

116

**MODELAÇÃO NUMÉRICA DA INTERFACE AR-ÁGUA  
EM PROCESSOS DE ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE  
GASES EM TANQUES CILÍNDRICOS**

**Alan Cavalcanti da Cunha**



Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Hidráulica e Saneamento

ORIENTADOR: Prof. Dr. Harry Edmar Schulz



SÃO CARLOS - SP

1998

Class.	TESE - EESC
Cuti.	1751
Tombo	0122/99

31100006870

S/S 1035053

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento  
da Informação do Serviço de Biblioteca - EESC-USP

C972m

Cunha, Alan Cavalcanti da

Modelação numérica da interface ar-água em processos de absorção e dessorção de gases em tanques cilíndricos / Alan Cavalcanti da Cunha.-- São Carlos, 1998.

Tese (Doutorado) -- Escola de Engenharia de São Carlos-Universidade de São Paulo, 1998.

Área: Hidráulica e Saneamento.

Orientador: Prof. Dr. Harry Edmar Schulz.

1. Modelação numérica - volumes finitos - turbulência. 2. Interface ar-água. 3. Absorção - dessorção. I. Título.

**FOLHA DE APROVAÇÃO**

Candidato: Engenheiro **ALAN CAVALCANTI DA CUNHA**

Tese defendida e aprovada em 21-05-1999  
pela Comissão Julgadora:

---

Prof. Titular **FAZAL HUSSAIN CHAUDHRY (Substituto)**  
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)

---

  
Prof. Titular **WOODROW NELSON LOPES ROMA**  
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)

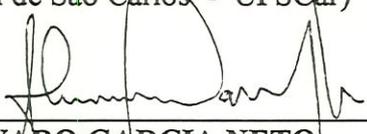
---

  
Prof. Doutor **RODRIGO DE MELO PORTO**  
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)

---

  
Prof. Doutor **ARTUR DAREZZO FILHO**  
(Universidade Federal de São Carlos - UFSCar)

---

  
Prof. Associado **ÁLVARO GARCIA NETO**  
(Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo)

---

  
Prof. Associado **EDUARDO CLETO PIRES**  
Coordenador da Área de Hidráulica e Saneamento

---

  
p/ **JOSE CARLOS A. CINTRA**  
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

## DEDICATÓRIA

*Ao meu pai Aluizio Cunha (in memorium) e à minha mãe Ioneida Cunha, pelo amor, dedicação e incentivo, que ficarão guardados em mim para sempre.*

*Aos meus irmãos Aluizio Jr., Alex Cunha e Ioneida do Socorro pela união, força e amizade divididas.*

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Harry Edmar Schulz pela excelente orientação, força e sugestões ao longo do desenvolvimento desta tese.

Ao Prof. Dr. Arthur Darezzi Filho pelo incentivo e contribuição nas importantes críticas e sugestões no decorrer do trabalho de pesquisa, principalmente na etapa de desenvolvimento numérico.

Ao amigo Luis Américo Monteiro Júnior, pela contribuição no desenvolvimento de implementação e otimização do algoritmo computacional, principalmente na sua fase final.

Ao Prof. Dr. Fazal Hussain Chaudhry, pelos incansáveis gestos de cooperação e apoio ao trabalho.

À Helenilza Cunha, pelo amor, dedicação e apoio durante todo o desenvolvimento do trabalho, demonstrando enorme capacidade de cooperação e ter se revelado uma companheira inigualável.

Aos meus primos Luis e Ionilde, Luis Alfredo e Lilia pelos felizes momentos em seu "Apart Hotel", em São Paulo.

Ao meu grande amigo Barbosa pelos seus ensinamentos práticos sobre reaeração.

À minha tia Iris, que sempre me deu força desde a época do cursinho.

Às amigas Heloisa e Neuza pelos momentos agradáveis que passamos juntos.

Aos amigos-irmãos Vânia e Du e a todos os amigos da turma da viola.

Aos meus amigos e colegas do departamento de hidráulica e saneamento.

Ao CNPq, pela concessão financeira instituída na forma de bolsa de doutorado.

À FAPESP, pela concessão financeira de equipamento e suporte computacional.

# SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	i
LISTA DE TABELAS.....	iii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	iv
RESUMO.....	xi
<i>ABSTRACT</i> .....	xii
<b>I - INTRODUÇÃO.....</b>	<b>01</b>
1.0 - Relevância dos Estudos em Tanques de Mistura.....	01
1.2 - A Relevância da Mecânica dos Fluidos Computacional, Ferramenta deste Trabalho .....	06
1.2.1 - A Utilização do Computador como Ferramenta de Análise.....	06
1.3 - Localização do Presente Estudo com Relação a Estudos Similares sobre Tanques de Mistura .....	07
1.4 - A Turbulência como Tema do Trabalho .....	08
1.5 - Conteúdo da Tese.....	09
<b>II - OBJETIVOS.....</b>	<b>10</b>
<b>III - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....</b>	<b>11</b>
3.0 - Fundamentos da Transferência de Massa na Interface Ar-água.....	13
3.1 - Uma Visão da Abrangência do Tema .....	13
3.2 - Sistemas e Processos Simulados .....	15
3.3 - Lei de Fick da Difusão Molecular.....	16
3.4 - Difusão Advectiva.....	18
3.5 - O Coeficiente de Difusão Molecular Gás-Líquido ( $D_{AB}$ ).....	19
3.6 - A Constante da lei de Henry para Compostos Orgânicos na Água .....	21
3.7 - Difusão Turbulenta.....	24
3.8 - Modelos Clássicos de Transferência de Gases na Interface Ar-Água.....	27
3.9 - Desenvolvimento do Fundamento Teórico dos Modelos de Transferência na Interface Ar-Água .....	29
3.10 - Métodos de Obtenção do Coeficiente de Reaeração $K_2$ .....	36
3.11 - A Influência da Temperatura no Coeficiente de Troca $K_T$ .....	39
3.12 - Taxa de Dissipação de Energia Cinética - $\varepsilon$ .....	44
3.13 - A Variação Temporal da Concentração em um Corpo Líquido .....	45

3.14 - Reatores Gás-Líquido Agitados Mecanicamente: Absorção e Dessorção de Gases .....	48
3.15 - Equações Básicas Utilizadas em Tanques de Mistura .....	50
3.16 - Escoamento em Tanques de Mistura e Parâmetros Turbulentos Relevantes .....	51
3.17 - A Formulação Matemática da Turbulência .....	66
3.18 - A Natureza da Turbulência e os Modelos de Turbulência .....	71
3.18.1 - Considerações sobre Modelos Turbulentos .....	73
3.18.2 - Modelos de Turbulência de Duas Equações .....	75
3.18.3 - Desenvolvimento do Modelo de Duas Equações: o Modelo $k - \varepsilon$ .....	77
3.19 - Métodos Numéricos Aplicados aos Escoamentos Elípticos com Recirculação .....	81
3.19.1 - Convergência e Precisão dos Esquemas de Diferenças Finitas para Problemas de Condução e Convecção Bi-dimensionais .....	82
3.19.2 - Funções de Interpolações Unidimensionais .....	84
3.19.3 - Diferenças Centrais .....	86
3.19.4 - Esquema <i>UPWIND</i> .....	87
3.19.5 - A Solução Exata (Esquema Exponencial) .....	87
3.19.6 - A Representação do Fluxo Total .....	90
3.19.7 - Esquema da Lei de Potência .....	92
3.19.8 - Linearização do Termo Fonte .....	92
3.19.9 - Discretização da Equação da Continuidade .....	94
3.19.10 - Equações Diferenciais de Conservação para o Volume de Controle de uma Malha de Discretização .....	95
3.19.11 - Equação de Transporte Final Discretizada.....	96
3.19.12 - A Subrelaxação e a Sobrelaxação .....	97
3.19.13 - Discussões sobre os Esquemas de Discretização – Falsa Difusão .....	98
3.19.14 - Soluções Numéricas de Problemas em Escoamento de Fluido Incompressível - Tratamento do Acoplamento de Pressão-Velocidade.....	100
 <b>IV - METODOLOGIA</b> .....	 103
4.1 – Método de Volumes Finitos (MVF) e Formulação Matemática das Equações de Transporte para Tanques de Mistura .....	103
4.2 - As Equações Diferenciais – Formulação Matemática .....	103
4.3 - Discretização e Obtenção das Equações Aproximadas de Volumes Finitos para uma Situação Bidimensional em Tanques de Mistura .....	104
4.4 - As Correções das Pressões e das Velocidades .....	106

4.5 - A Equação de Correção de Pressão .....	107
4.6 - Descrição dos Algoritmos SIMPLE, SIMPLER E SIMPLEC .....	108
4.6.1 - O Algoritmo SIMPLE – Semi IMPLICIT Linked Equations .....	108
4.6.2 - O Algoritmo SIMPLER .....	109
4.6.3 - O Algoritmo SIMPLEC.....	111
4.7 - Métodos Numéricos Aplicados aos Escoamentos Elípticos com Recirculação .....	113
4.7.1 - Características Construtivas dos Tanques de Mistura - Domínios Físicos de Discretização .....	115
4.7.2 - Método Utilizado para a Previsão do Escoamento.....	117
4.7.3 - Condições de Contorno – Aspectos Gerais do Método Numérico.....	126
4.7.3.1 - Condições de Contorno – Aspectos Numéricos.....	128
4.7.4 - Procedimento Numérico para Elaboração do Algoritmo Tank-For.....	131
4.8 - Comentários acerca da Metodologia .....	139
<b>V - RESULTADOS DO ALGORITMO COMPUTACIONAL .....</b>	<b>140</b>
5.1 - Exigências do Algoritmo.....	140
5.2 - Escopo e Limitações do Algoritmo Computacional Tank-For.....	142
5.3 - Detalhes do Algoritmo Computacional Tank-For.....	143
5.3.1 - Princípios da Organização .....	143
5.4 - Cálculo dos Coeficientes Experimentais $k_t$ e Parâmetros Físico-químicos e hidráulicos do Modelo de Transferência de Massa .....	148
5.5 - Testando o Solver do Sistema Linear .....	151
5.6 - Resultados do Algoritmo TANK-FOR .....	152
5.6.1 - Escoamento no Tanque de Mistura com Turbina de Seis Pás Planas Inclinadas 45° .....	154
5.6.2 - Resultados dos Parâmetros Turbulentos e Grandezas Escalares (Concentração dos Gases) .....	161
<b>VI – CONCLUSÃO.....</b>	<b>173</b>
<b>VII – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>178</b>

## LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.1a – Vista geral de uma estação de tratamento de águas residuárias industriais .....	03
FIGURA 1.1b – Visão detalhada dos aeradores mecânicos .....	03
FIGURA 1.2 - Desenho esquemático dos principais componentes dos tanques de mistura: os inibidores de vórtice (Baffles) e a turbina .....	05
FIGURA 3.1 - Variação da constante de Henry com a temperatura, $H_E$ (ATM)...	23
FIGURA 3.2 - Gradiente de concentração na interface ar-água como assumida pela teoria de dois filme .....	30
FIGURA 3.3 - Desafios na pesquisa da engenharia química .....	49
FIGURA 3.4 - Discretização unidimensional.....	85
FIGURA 3.5 - Curvas obtidas da equação 3.87, solução exata para os vários valores de $P_e$ .....	89
FIGURA 3.6 - Um volume de controle típico com malha deslocada para o caso bi-dimensional.....	90
FIGURA 4.1 - Esquema do fluxograma geral do algoritmo.....	114
FIGURA 4.2 - Tanque de agitação hidrodinâmica e características construtivas	117
FIGURA 4.3a - Domínio de cálculo (malha de integração).....	118
FIGURA 4.3b - Arranjo da malha deslocada .....	118
FIGURA 4.4 - Detalhes da malha deslocada bi-dimensional .....	120
FIGURA 4.5a - Volume de controle para $U_e$ .....	121
FIGURA 4.5b - Volume de controle para $U_w$ .....	121
FIGURA 4.5c - Volume de controle para $W_n$ .....	122
FIGURA 4.5d - Volume de controle para $W_s$ .....	122
FIGURA 4.6 - Contorno “no-slip” – (radial e axial) no tanque cilíndrico.....	129
FIGURA 4.7 - Contorno “free-slip” (radial e axial) no tanque cilíndrico.....	129
FIGURA 4.8 - Esquema do contorno da turbina “no-slip” (imóvel) nas direções radial e axial no tanque cilíndrico .....	130
FIGURA 4.9 - Divisão do Domínio em várias regiões do tanque de agitação ...	134
FIGURA 4.10 - Detalhes da malha de integração e célula computacional .....	135
FIGURA 4.11 - Estrutura matricial das equações aplicada à malha bidimensional .....	136
FIGURA 4.12 – Fluxograma do algoritmo principal .....	137
FIGURA 4.11 - Fluxograma da subrotina concentração adimensional .....	138
FIGURA 5.1 – Tanque de mistura – campos de velocidades iniciais .....	145
FIGURA 5.2a– Perfis de velocidade iniciais (parabólico) CUNHA, 1993 .....	145

FIGURA 5.2b – Perfis de velocidade iniciais (parabólico) MOMESSO, 1996 .....	146
FIGURA 5.2c – Perfis de velocidade iniciais (parabólico) HSIEH <i>et al</i> , 1993 .....	146
FIGURA 5.2d – Perfis de velocidade iniciais (parabólico) BARBOSA, 1989.....	146
FIGURA 5.3 – Testando o solver (matriz com banda esparsa) .....	151
FIGURA 5.4 – Variação percentual de elementos não-nulos da matriz esparsa versus ordem da matriz .....	152
FIGURA 5.5 - Escoamento gerado pelo algoritmo TANK-FOR .....	154
FIGURA 5.6a - Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	155
FIGURA 5.6b- Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	155
FIGURA 5.6c - Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	155
FIGURA 5.7a - Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	156
FIGURA 5.7b- Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	156
FIGURA 5.7c - Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	156
FIGURA 5.8a - Perfis de velocidade (CUNHA, 1993)) .....	157
FIGURA 5.8b- Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	157
FIGURA 5.8c - Perfis de velocidade (CUNHA, 1993) .....	157
FIGURA 5.9a - Perfis de velocidade (MOMESSO, 1996) .....	158
FIGURA 5.9b- Perfis de velocidade (MOMESSO, 1996) .....	158
FIGURA 5.10a-Perfis de velocidade (HSIEH <i>et al</i> , 1993) .....	158
FIGURA 5.10b-Perfis de velocidade (HSIEH <i>et al</i> , 1993) .....	159
FIGURA 5.11a-Perfis de velocidade (BARBOSA, 1989) .....	159
FIGURA 5.11b-Perfis de velocidade (BARBOSA, 1989) .....	159
FIGURA 5.12a – Distribuição de energia cinética turbulenta .....	162
FIGURA 5.12b – Distribuição de velocidade e energia cinética turbulenta .....	162
FIGURA 5.13a – Distribuição da taxa de dissipação de energia cinética .....	163
FIGURA 5.13b – Distribuição da taxa de dissipação de energia cinética.....	163
FIGURA 5.14a – Distribuição da viscosidade turbulenta .....	164
FIGURA 5.14b – Distribuição da viscosidade turbulenta .....	165
FIGURA 5.15a – Distribuição da concentração para acetileno .....	165
FIGURA 5.15b-Distribuição da concentração para gases orgânicos e O <sub>2</sub> .....	166
FIGURA 5.16a – Absorção de oxigênio em regime transiente .....	167
FIGURA 5.16b – Absorção de oxigênio em regime transiente .....	167
FIGURA 5.16c – Absorção de oxigênio em regime transiente .....	168
FIGURA 5.17a – Dessorção de C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> em regime permanente.....	168
FIGURA 5.17b – Dessorção de C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> em regime permanente.....	169
FIGURA 5.17c – Dessorção de C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> em regime permanente.....	169
FIGURA 5.18-Variação da concentração em uma célula próxima da superfície	172

## LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1 - Valores de difusividades moleculares estimados para os gases metano, acetileno, propano e oxigênio.....	20
TABELA 3.2 - Valores de $\beta$ e relações entre $K_L$ , $A$ , $H$ e $D_I$ para vários valores de $N$ .....	34
TABELA 3.3 - Razões entre coeficientes de reaeração e coeficientes de volatilização de vários compostos encontrados na literatura .....	38
TABELA 3.4 - Valores de $\theta$ (mínimos, máximos e médios) nas faixas de temperatura de 15 a 25°C, 20 a 30°C e 15 a 30°C.....	42
TABELA 3.5 - Valores de $\theta$ reportados na literatura para o coeficiente de reaeração $K_2$ .....	43
TABELA 3.6 - Parâmetros característicos das equações de transporte .....	93
TABELA 3.7 - valores de parâmetros do modelo $k - \epsilon$ .....	94
TABELA 3.8 - Discussão sobre a influência dos coeficientes em vários esquemas de discretização .....	99
TABELA 3.9 - Coeficiente de difusividade para a pressão $\Gamma_p$ .....	102
TABELA 4.1a - Dimensões do conjunto de agitação e tanques de mistura utilizadas em CUNHA (1993) .....	115
TABELA 4.1b - Dimensões do conjunto de agitação e tanques de mistura utilizadas em HSIEH <i>et al.</i> (1993) .....	116
TABELA 4.1c - Dimensões do conjunto de agitação e tanques de mistura utilizadas em BARBOSA (1989).....	116
TABELA 4.2 - Subrotinas, funções e especificações do algoritmo principal TANK-FOR .....	132
TABELA 5.1a - Alguns pontos do endereçamento do domínio .....	144
TABELA 5.1b - Alguns pontos do endereçamento do domínio .....	144
TABELA 5.1c - Alguns pontos do endereçamento do domínio .....	145
TABELA 5.2 - Resultados numéricos do problema do escoamento desenvolvido em tubo cilíndrico com algoritmo TANK.FOR.....	153

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A$	Constantes de integração
$A( Pe )$	Função que depende do esquema de interpolação adotado
$A_P$	Coefficiente da matriz de cinco pontos – centro
$A_W$	Coefficiente da matriz de cinco pontos – oeste
$A_E$	Coefficiente da matriz de cinco pontos – leste
$A_N$	Coefficiente da matriz de cinco pontos – norte
$A_S$	Coefficiente da matriz de cinco pontos – sul
$a$	Área, $m^2$
$a$	Velocidade característica do sistema, m/s
$b$	Termo independente na equação de cinco pontos
$B_i^\phi$	Termo independente na equação de cinco pontos
$c$	Distância do impulsor ao fundo do tanque, m
$C$	Valor instantâneo da concentração, $kg/m^3$
$C_0$	Concentração inicial, $kg/m^3$
$C(t)$	Concentração média temporal, $kg/m^3$
$C_s$	Concentração de saturação, $kg/m^3$
$C_b$	Concentração do gás dissolvido no volume do líquido, $kg/m^3$
$\bar{C}$	Valor médio temporal da concentração $C$ , $kg/m^3$
$C'$	Flutuação turbulenta da concentração $C$ em torno de $\bar{C}$ , $kg/m^3$
$C_a$	Concentração no ar, $kg/m^3$
$C_w$	Concentração na água, $kg/m^3$
$C_P$	Termo independente na equação de Poisson
$C_P'$	Termo independente na equação de Poisson (correção)
$C_D$	Coefficiente de dissipação de energia cinética da turbulência
$C_\mu$	Constante da equação da viscosidade aparente da turbulência
$C_k$	Constante da equação da viscosidade aparente da turbulência
$C_1$	Coefficiente do termo de geração na equação diferencial da taxa de dissipação de energia de turbulência
$C_2$	Coefficiente do termo-dissipativo na equação diferencial da taxa de dissipação de energia de turbulência
$C_{ss}$	Constante da dissipação de energia cinética da turbulência para a superfície livre
COVs	Compostos orgânicos voláteis
COSVs	Compostos orgânicos semi-voláteis

$d_i = A_i a_i$	Razão entre coeficiente da matriz e a área correspondente da face $i$
$d_f$	$a_i/(\rho (A_i - S_i))$ , coeficiente
$D$	Diâmetro da turbina da impulsor, m
$D_t$	Difusão turbulenta, $m^2/s$
$D_e$	Soma das difusividades molecular e turbulenta, $m^2/s$
$D_a$	Difusividade molecular da substância no ar, $m^2/s$
$D_w$	Difusividade molecular da substância na água, $m^2/s$
$D_\phi$	Condutância de difusão
$D_e$	Condutância da difusão na face leste, $m^2/s$
$D_w$	Condutância da difusão na face oeste, $m^2/s$
$D_n$	Condutância da difusão na face norte, $m^2/s$
$D_s$	Condutância da difusão na face sul, $m^2/s$
$D_i$ ou $D_{AB}$	Coeficiente de difusão molecular ou difusividade molecular, $m^2/s$
$E$	Constante de Rugosidade nas funções de parede
$E_i$	Coeficiente de difusão turbulento (efetivo) médio espacial, $m^2/s$
$F$	Fluxo de massa por unidade de área, $kg/m^2.s$
$F_\phi$	Vazão volumétrica, $m^3/s$
$F_e$	Vazão volumétrica na face leste, $m^3/s$
$F_w$	Vazão volumétrica na face oeste, $m^3/s$
$F_n$	Vazão volumétrica na face norte, $m^3/s$
$F_s$	Vazão volumétrica na face sul, $m^3/s$
$g$	Aceleração da gravidade, $m/s^2$
$G$	Taxa de Geração de turbulência, $kg/m.s^3$
$G_k$	Geração de energia cinética turbulenta, $kg/m.s^3$
$G_w$	Taxa de geração de turbulência próxima ao nó da parede, $kg/ms^3$
$h$	Profundidade da lâmina d'água n tanque, m
$H$	Altura da superfície do líquido no tanque (volume/área), m
$H_e$	Constante da Lei de Henry, atm ou kPa
$J$	Fluxo total de $\Phi$ através da face da célula computacional/área, $kg/s$
$J(t)$	Fluxo difusivo não estacionário, $kg/s$
$J_x$	Fluxo de $\Phi$ na direção $x$ através da face da célula computacional/área, $kg/s$
$J_y$	Fluxo de $\Phi$ na direção $y$ através da face da célula computacional/área, $kg/s$
$J_z$	Fluxo de $\Phi$ na direção $z$ através da face da célula computacional/área, $kg/s$
$J_\phi$	Fluxo da quantidade $\Phi$ na direção $x$

$J_e$	Fluxo de $\Phi$ na face leste do volume de controle, kg/s
$J_w$	Fluxo de $\Phi$ na face oeste do volume de controle, kg/s
$J_n$	Fluxo de $\Phi$ na face norte do volume de controle, kg/s
$J_s$	Fluxo de $\Phi$ na face sul do volume de controle, kg/s
$K$	Coefficiente de transferência de massa, $s^{-1}$
$K_2$	Coefficiente de reaeração atmosférica, $s^{-1}$
$K_G$	Coefficiente do filme gasoso, $s^{-1}$
$K_L$	Coefficiente do filme líquido, $s^{-1}$
$K_{L(exp)}$	Coefficiente de transferência experimental, $s^{-1}$
$K_{L(sim)}$	Coefficiente de transferência simulado, $s^{-1}$
$K_i$	Coefficiente de transferência de massa, $s^{-1}$
$k$	Energia cinética turbulenta por unidade de massa, $m^2/s^2$
$k_s$	Energia cinética turbulenta definida na superfície, $m^2/s^2$
$l$	Largura da turbina, m
$L$	Comprimento do diâmetro ou escala de comprimento turbulenta, m
MDF	Método das Diferenças Finitas
MVF	Método dos Volumes Finitos
$m$	Fluxo de massa, kg/s
$m$	Massa do gás dissolvido, kg
$m^*$	Adimensional que indica o nível de turbulência (modelo de Schulz)
$M_B$	Peso molecular do solvente B
$n$	Expoente do modelo de Schulz
$n_b$	Número de pás da turbina
$N$	Velocidade rotacional do impulsor (frequência), $s^{-1}$
$N_P$	Número de potência
$N_{QP}$	Número de bombeamento primário
$N_{QT}$	Número de bombeamento total
PCBs	Policlorobenzeno
PTD	Turbina de pás planas de escoamento descendente ( <i>Pitched blade downflow turbine</i> )
$p_i$	Pressão de vapor saturado do componente $i$ , $N/m^2$
$P_e$	Número de Peclet
$P$	Pressão, $N/m^2$
$P_P$	Pressão definida no ponto central do volume de controle
$P_W$	Pressão definida no ponto a oeste do ponto P
$P_E$	Pressão definida no ponto a leste do ponto P
$P_N$	Pressão definida no ponto a norte do ponto P

$P_S$	Pressão definida no ponto a sul do ponto P
$P$	Potência do impulsor, Watt
$P^*$	Pressão estimada
$P_P^*$	Pressão estimada no ponto P
$P_W^*$	Pressão estimada na face oeste de P
$P_E^*$	Pressão estimada na face leste de P
$P_N^*$	Pressão estimada na face norte de P
$P_S^*$	Pressão estimada na face sul de P
$P'$	Pressão de correção de P
$P_P'$	Pressão de correção de P
$P_W'$	Pressão estimada na face oeste de P
$P_E'$	Pressão estimada na face leste de P
$P_N'$	Pressão estimada na face norte de P
$P_S'$	Pressão estimada na face sul de P
$P(t)$	Probabilidade do elemento superficial
$Pr_{\bar{k}}$	Número de Prandtl para o transporte de energia cinética da turbulência
$Pr_{\varepsilon}$	Número de Prandtl para o transporte da dissipação de energia cinética da turbulência
RPM	Rotações por minuto, $\text{min}^{-1}$
RPS	Rotações por segundo, $\text{s}^{-1}$
$r$	Coordenada radial cilíndrica
$R$	Coordenada radial ou raio do impulsor, m
$R_{ij} = K_i/K_j$	Razão de transformação
$Re$	Número de Reynolds
$s$	= $a/h$ (taxa de renovação superficial) no modelo de Schulz
$S_i$	Termo que multiplica $\Phi$ na equação de cinco pontos
$S_{\Phi}$	Taxa volumétrica de crescimento ou decaimento de $\Phi$ (Termo fonte na equação de $\Phi$ )
$S_C^{\Phi}$	Parte constante do termo fonte de $\Phi$ na EDF
$S_P^{\Phi}$	Parte que multiplica a variável termo fonte de $\Phi$ (parte não-positiva) na EDF
$Sh_a$	Número de Sherwood para o ar
$Sh_w$	Número de Sherwood para a água
$t$	Tempo, s
$t^* = t + \Delta t$	Intervalo de integração temporal, s

$T$	Diâmetro do tanque, m
$T$	Temperatura do fluido, °C ou K
$T_i$	Termo que engloba a derivada temporal (equação de cinco pontos)
$U$	Valor instantâneo da velocidade, m/s
$\bar{U}$	Valor médio temporal da velocidade radial $U$ , m/s
$U'$	Flutuação turbulenta da velocidade $U$ em torno de $\bar{U}$ , m/s
$U_r$	Velocidade média radial, m/s
$U_{tip}$	Velocidade linear da extremidade do impulsor, m/s
$\hat{U}, \hat{W}$	Termos de velocidades referentes a $U$ e $W$ - SIMPLER
$u^*$	Velocidade de fricção (atrito), m/s
$ U_w $	Valor absoluto da velocidade média paralela à parede próxima ao nó da parede, m/s
$V$	Volume da célula, m <sup>3</sup>
$V_A$	Volume molar de um mol do líquido puro no ponto de bolha do soluto A, cm <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup>
$V_C$	Volume crítico do gas do soluto A, cm <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup>
$V_L$	Volume do líquido no tanque, m <sup>3</sup>
$V$	Valor instantâneo da velocidade tangencial, m/s
$\bar{V}$	Valor médio temporal da velocidade tangencial $V$ , m/s
$V'$	Flutuação turbulenta da velocidade $V$ em torno de $\bar{V}$ , m/s
$V_t$	Velocidade (comprimento de mistura), m/s
$W$	Valor instantâneo da velocidade axial, m/s
$\bar{W}$	Valor médio temporal da velocidade $W$ , m/s
$W'$	Flutuação turbulenta da velocidade $W$ em torno de $\bar{W}$ , m/s
$W_A$	Velocidade média axial, m/s
$w_i$	Fração mássica (adimensional)
$x_i$	fração molar (adimensional)
$x_{min}^*$	Posição da interface, segundo um sistema de referência apropriado (modelo de Schulz)
$x_i$	Distância genérica, m
$y$	Distância de um ponto próximo à parede, m
$y_i$	Distância vertical, m
$Y^+$	Número de Reynolds próximo da parede
$Y^l$	Distância de um nó da parede à partir da parede
$z$	Coordenada axial, m

## Alfabeto

## grego

$\alpha_{u,v}$	Fator de relaxamento
$\beta$	Constante (modelo de Schulz)
$\partial w / \partial y$	Gradiente de concentração na direção $y$ , em termos de fração mássica
$\partial C_i / \partial y$	Gradiente de concentração na direção $y$ , em termos de massa
$\delta_a$	Espessura da camada estagnada no ar, m
$\delta_r$	Distância diferencial na direção $r$
$\delta_w$	Espessura da camada estagnada na água, m
$\delta_z$	Distância diferencial na direção $z$
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$\nabla$	Operador Gradiente
$\nabla^2$	Operador Laplaciano
$\Delta P$	Queda de pressão, N/m <sup>2</sup>
$\Delta r$	Espaçamento radial do volume de controle
$\Delta V$	Volume do elemento de controle, m <sup>3</sup>
$\Delta z$	Espaçamento axial do volume de controle
$\Delta_{rw}$	Espaçamento radial à esquerda do volume de controle, m
$\Delta_{re}$	Espaçamento radial à direita do volume de controle, m
$\Delta_{zn}$	Espaçamento radial acima do volume de controle, m
$\Delta_{zs}$	Espaçamento radial abaixo do volume de controle, m
$\Delta t$	Intervalo de tempo
$\varepsilon$	Taxa de dissipação de energia turbulenta, m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>
$\varepsilon_w$	Taxa de dissipação de energia em um nó próximo da parede, m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>
$\varepsilon_s$	Taxa de dissipação de energia próximo da superfície, m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>
$\Phi$	Fator de dissociação da água (adimensional) – Equação de Wilke-Chang
$\Phi$	Variável genérica ou de transporte ( $k, \varepsilon, P$ , Concentração)
$\Phi^*$	É o valor de $\Phi$ resultante da iteração anterior
$\bar{\Phi}$	Variável genérica média ( $k, \varepsilon, P$ , Concentração)
$\gamma_i$	coeficiente de atividade
$\gamma_{H_2O}$	fração molar de água na fase de vapor em CNTP
$\gamma^\infty$	coeficiente de atividade de diluição infinita
$\Gamma_\Phi$ ou $\Gamma$	Coeficiente de dispersão, m <sup>2</sup> /s
$\Gamma_{\Phi,eff}$	Coeficiente de dispersão efetiva, m <sup>2</sup> /s
$\kappa$	Constante de Von Karmann
$\mu$	Viscosidade, Pa.s

$\mu_B$	Viscosidade dinâmica do solvente, centi-Poise
$\mu_{eff}$	Viscosidade efetiva do escoamento turbulento
$\mu_t$	Viscosidade aparente da turbulência
$\nu_t$	Viscosidade cinemática, $m^2/s$
$\rho$	Massa específica do fluido (densidade) $kg/m^3$
$\rho'$	Termo de flutuação turbulenta temporal relativo a $\rho$
$\sigma_{eff}$	Coefficiente de difusão efetiva
$\sigma_\varepsilon$	Número de Prandtl para $\varepsilon$
$\sigma_k$	Número de Prandtl para $k$
$\theta$	Coordenada angular, rad (ou fator de correção de temperatura)
$\tau$	Tempo da absorção e dessorção dos gases (regime transiente), s
$\tau_w$	Tensão de cisalhamento na parede, $N/m^2$
$\tau_{ij}$	Tensão de cisalhamento no meio fluido, $N/m^2$
$\tau_{ij}$	Tensor de atrito
$\omega$	Velocidade angular, $s^{-1}$
$\omega$	Fator de sub ou sobre-relaxamento

### Índices

E, N, P, S, W	Pontos nodais de uma malha típica
e, n, s, w, Ne, Nw, ne, se, nE, sE, nw, sw	Pontos na fronteira do volume de controle
i	Pontos da malha na direção x
j	Pontos da malha na direção y
o	Indica o valor de uma variável no instante anterior
+	Refere-se a direita ou acima do ponto P
-	Refere-se a esquerda ou abaixo do ponto P
$\ a, b\ $	Representa o maior entre a e b

### Subíndices

$E, W, N e S$	Volume de controle na face referentes aos pontos $E, W, N e S$
$eff$	Efetivo
$nb$	Pontos vizinhos da malha
$t$	Turbulento

## RESUMO

CUNHA, A. C. (1998). *Modelação Numérica da Interface Ar-Água em Processos de Absorção e Dessorção de Gases em Tanques Cilíndricos*. São Carlos, 1998. 194p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

Um modelo numérico computacional foi desenvolvido para simular o escoamento turbulento e a transferência de gases na interface ar-água em tanque cilíndrico, em domínio bi-dimensional, pelo método de volumes finitos, utilizando o modelo de turbulência  $\kappa$ - $\epsilon$  padrão. O método utilizado para o acoplamento velocidade-pressão foi o **SIMPLER**. Utilizou-se a compartimentalização do domínio computacional em cinco regiões principais, a fim de melhor implementar o algoritmo computacional. O desenvolvimento da estrutura da malha foi feito para que fosse possível a sua implementação em computadores de pequeno porte, com técnicas de otimização de memória.

Para o contorno na superfície líquida foram utilizadas as condições de contorno *free-slip* e *no-slip*, e uma aproximação simplificada para a taxa de dissipação de energia. Os resultados de transferência de massa obtidos pela simulação foram comparados com aqueles obtidos em experimentos da literatura.

Palavras-chave: modelação numérica com modelo  $k$ - $\epsilon$ , turbulência na interface ar-água; absorção e desorção de gases; turbinas inclinadas de escoamento descendente (PTD).

## ABSTRACT

CUNHA, A. C. (1998). *Numerical Modelation of air-water interface in gas absorption and dessorption process in cylindrical tank*. São Carlos, 1998. 194p. Thesis (Doctorad) – São Carlos School of Engineering, University of São Paulo.

A computational numerical model was developed to simulate turbulent flows and gas transfer processes at the air-water interface in cylindrical tanks. The classical discretization of complete domain by the finite volume method was used. As a result of this methodology, a non linear system of equations is obtained. This system was solved using special memory optimization techniques, allowing to implement the numerical algorithms in small personal computers.

The standard  $\kappa$ - $\varepsilon$  model have been employed to predict the flow generated by **PTD** in cylindrical baffled vessel. The **SIMPLER** algorithm was used for the treatment of the pressure-velocity coupling. The computational program **TANK.FOR** was elaborated to simulate and to predict the two-dimensional flow in stirred tanks. A very dense grid in axial-direction was used to capture at least three points at the long the width of the impeller. Topics regarding to air-water interfaces, geometry of hydrodynamic systems, models for turbulent flows, are broached.

For the air-water interface boundaries the *free-slip* and *no-slip* conditions at the liquid surface was used, together with a simplified approximation for the local energy dissipation rate. The mass transfer results were compared with experimental data of the literature.

Keywords: numerical modelling with  $k$ - $\varepsilon$  model; turbulence at air-water interface; gas absorption and dessorption; pitched turbine impellers (**PTD**)

### 1. RELEVÂNCIA DOS ESTUDOS EM TANQUES DE MISTURA

O estudo dos escoamentos de fluidos tem um papel vital para a compreensão do funcionamento e da eficiência de muitos tipos de equipamentos aplicados em engenharia. Neste trabalho são ressaltados os escoamentos que envolvem processos de agitação e mistura em tanques, enfocando principalmente os processos de transferência de gases na interface ar-água, com vistas à aplicação em engenharia hidráulica e saneamento, como os aeradores mecânicos.

Segundo DICKEY *et al.* (1992), além daquela função da mistura propriamente dita, o processo de mistura é também considerado como fator preponderante que condiciona, por exemplo, as taxas de reação, eficiência de troca global de calor e massa nos equipamentos. Nessas situações, a mistura apresenta seus efeitos indiretos para alcançar um processo desejado.

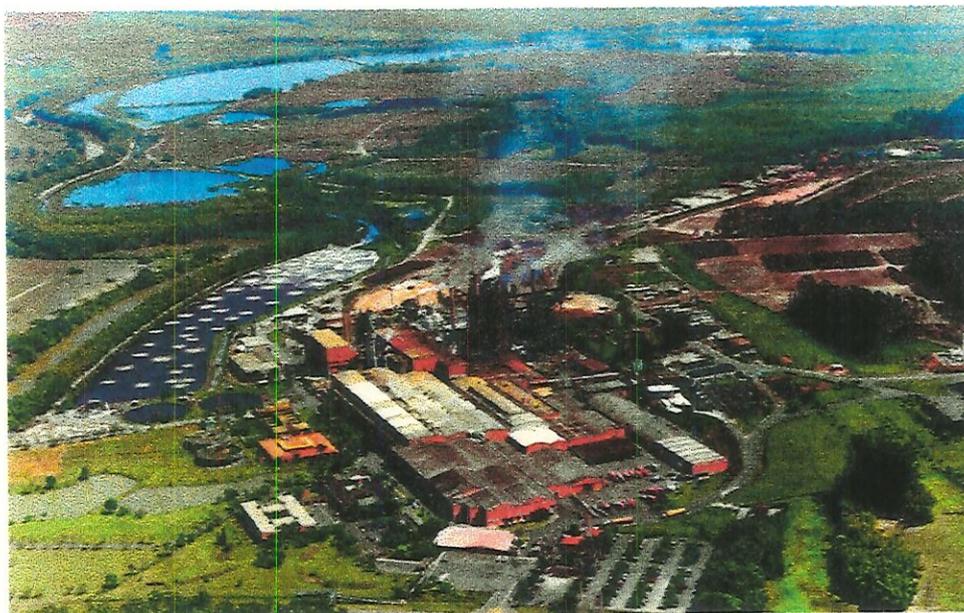
A agitação de fluidos usando impulsores mecânicos é provavelmente a mais importante e comum operação industrial para efetuar misturas, sendo sua principal função acelerar as taxas de transporte dos processos que ocorrem nos tanques (HARNBY *et al.*, 1985, NAGATA, 1975). A agitação se dá através da transferência de energia introduzida pelos impulsores rotativos para o interior do líquido, gerando movimentos hidrodinâmicos que promovem a mistura de líquidos (ou transferência de matéria) com o aumento da dispersão, bem como aumentam a transferência de calor e aceleram a uniformização de temperatura. Os exemplos práticos mais comuns de equipamentos encontrados nas indústrias em geral são os tanques de mistura, os aeradores mecânicos, reatores, entre outros. Entretanto, os misturadores agitados mecanicamente têm muitas limitações, como o alto consumo de energia por unidade de volume do líquido. Apesar disso, em todos estes casos, “o movimento do fluido reduz a espessura do “filme” resistente à passagem de massa através da superfície livre, ou diferentemente, ele aumenta o gradiente de concentração imediatamente adjacente à partícula ou superfície das fases dos componentes que estão sendo transferidos no fluido” (UHL, *et al.* 1966, 1967, 1986).

A agitação pode ser definida como uma operação que produz movimentos erráticos de forma mais ou menos homogênea no interior de fluidos (ou de sólidos que tenham comportamento similar aos fluidos). De acordo com REY (1970), a operação básica de agitação e mistura é uma das mais simples para se fazer uma análise científica, todavia não existe uma fórmula ou equação geral para predeterminar a velocidade com que a mistura se processa nos diferentes tipos de agitadores sob determinadas condições. Assim, face ao empirismo necessário para quantificar esta operação básica e a grande variedade de substâncias que podem ser misturadas, o número de agitadores é enorme, de modo que não existe uma classificação geral dos mesmos, baseada em agitadores padrão. Cada indústria tem desenvolvido seus próprios agitadores, o que ocasiona um obstáculo técnico para uma coordenação adequada.

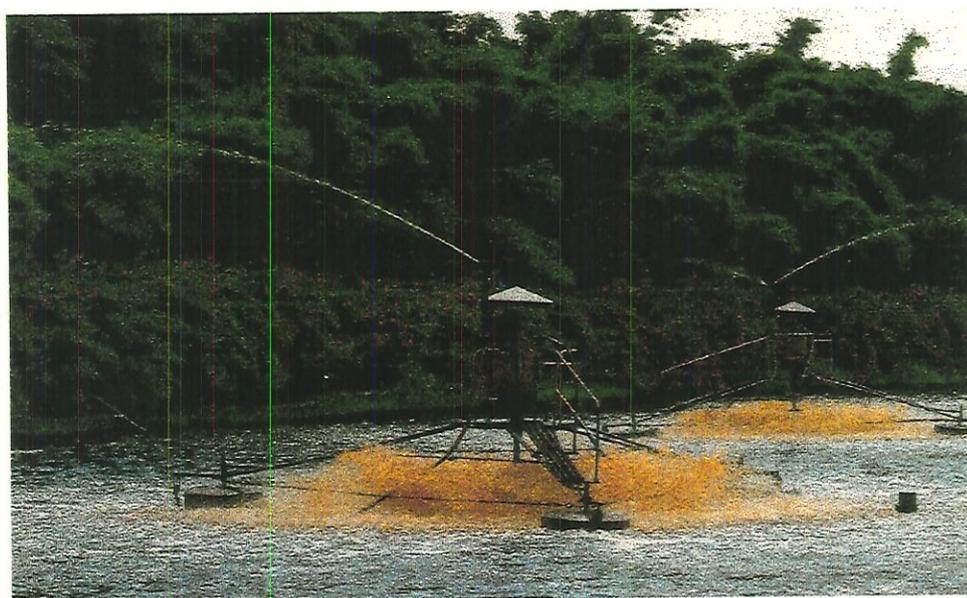
Por outro lado, devido às formas complexas dos tanques de mistura e dos escoamentos levarem a equações diferenciais que são difíceis de resolver, a abordagem empregando grupos adimensionais é mais frequentemente adotada para avaliar o desempenho dos equipamentos de mistura (UHL, *et al.* 1966).

Entretanto, no sentido de comparar as informações geradas por diferentes agitadores, é muito importante que se entenda a hidrodinâmica desses tanques de mistura, buscando compreender melhor as características turbulentas neles geradas, o campo de velocidades, o campo de tensões, de temperatura ou concentrações e outras características, de forma que, no processo de comparação, possa-se também explicar o desempenho dos equipamentos. O escoamento gerado no interior do tanque de mistura evidentemente depende significativamente de suas características geométricas e do impulsor, para fins de aplicações da engenharia hidráulica e saneamento.

Desta forma existe um interesse particular em descrever escoamentos turbulentos multidimensionais em tanques de mistura. O objetivo é tornar possível uma melhor análise de fenômenos físicos relevantes, tais como a aeração atmosférica induzida por impulsores mecânicos, cujo fenômeno básico é a transferência de gases através da interface gás-liquido (ver figura 1.1).



**Figura 1.1a:** Vista geral de uma estação de tratamento de águas residuárias industriais. **Fonte:** Champiom Papel Celulose – Mogi-Guaçu/SP.



**Figura 1.1b:** Visão detalhada dos aeradores mecânicos na referida estação de tratamento de águas residuárias industriais. **Fonte:** Champiom Papel Celulose – Mogi-Guaçu/SP.

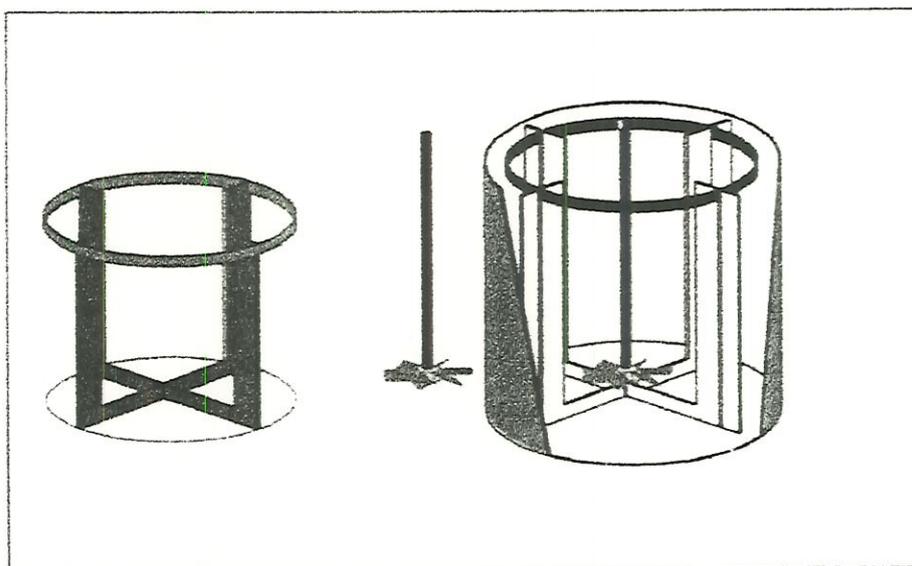
O estudo da transferência de gases em interfaces ar-água (caso particular de interfaces gás-líquido), tanto em escoamentos naturais (rios, córregos, lagos, etc) como nos artificiais (tanques, canais, etc) não é recente. Segundo CUNHA (1993) desde as primeiras décadas deste século os pesquisadores têm procurado formas de quantificar convenientemente o fenômeno, que apesar dos esforços tem se mostrado arredo quanto às quantificações definitivas, uma vez que as dificuldades estão associadas ao fato dos sistemas estudados estarem sujeitos à agitação turbulenta. Neste tipo de estudo os pesquisadores concentram-se principalmente na “previsão” do coeficiente de transferência, representado por  $K$ , para o qual não se possui ainda um equacionamento geral definitivo, quando se consideram parâmetros de escoamento facilmente mensuráveis e parâmetros físico-químicos comumente utilizados para quantificar os processos de transferência na interface ar-água.

De acordo com BARBOSA (1997), RATHBUN *et al.* (1978) e outros, os coeficientes de reaeração usados em modelos de previsão são geralmente estimados a partir de equações de natureza teórica, empírica ou semi-empírica. Por um lado os modelos teóricos se apresentam inadequados por conterem parâmetros não facilmente relacionados com o escoamento ou características hidráulicas desse escoamento. Por outro lado, tornam-se capazes de preverem satisfatoriamente  $K$  *coeficiente* somente quando os referidos parâmetros são semelhantes àqueles em que as equações se basearam, tais como velocidade, profundidade, declividade média, principalmente no que se refere aos escoamentos naturais.

Levando-se em consideração a grande quantidade de trabalhos sobre o assunto e a disponibilidade enorme de dados de coeficientes de transferência de gases em diversos tipos de escoamentos, inclusive em equipamentos como os tanques de reaeração, verificou-se a viabilidade e oportunidade de efetuar uma abordagem numérica para o assunto. Optou-se efetuar uma análise numérica bi-dimensional do escoamento, elaborada de forma a permitir verificar a operacionalidade dos aeradores mecânicos e fazer estudos sobre os processos de transferência de massa através da interface ar-água, *via* simulação do escoamento turbulento. Outras aproximações numéricas, encontradas na literatura, têm produzido resultados satisfatórios em situações de escoamentos naturais onde os parâmetros desconhecidos são calibrados a partir de dados experimentais, o que sugeriu a viabilidade do presente trabalho.

Com base nos argumentos acima apresentados para analisar problemas como o da transferência de gases na interface ar-água em tanques de mistura ou aeradores mecânicos, foi desenvolvido neste trabalho um algoritmo para implementação de um algoritmo computacional, denominado TANK.FOR, o qual utiliza um método iterativo (baseado nos procedimentos da família SIMPLE de PATANKAR & SPALDING (1972) – a fim de obter os campos de velocidade, pressão e, por consequência o campo de concentração do gás no sistema.

Um dos equipamentos de referência utilizado neste estudo, que corresponde a um dos sistemas físicos simulados, é formado por um conjunto de dois tanques de mistura idênticos (aeradores mecânicos induzidos por hélices do tipo turbina dotados de seis pás planas inclinadas  $45^\circ$ ), como indicado na figura 1.2. Os dados de transferência de gases na interface ar-água obtidos em experimentos neste equipamento e em similares, foram utilizados para verificar o acerto do método numérico. Os dados experimentais relativos ao escoamento (campos de velocidade e pressão) foram obtidos de estudos em tanques cujos resultados são encontrados na literatura.



**Figura 1.2:** Desenho esquemático dos principais componentes dos tanques de mistura, na sequência: os inibidores de vórtices (baffles), a turbina e um corte do tanque de mistura com os componentes anteriores no seu interior – CUNHA (1993).

## 1.2. A RELEVÂNCIA DA MECÂNICA DOS FLUIDOS COMPUTACIONAL, FERRAMENTA DESTE TRABALHO

O aumento da potencialidade e velocidade dos computadores atuais acoplados ao estado de desenvolvimento dos algoritmos permite, nos dias de hoje, efetuar a simulação numérica de processos de mistura. As técnicas permitem calcular campos de concentração e de temperatura em reatores, com um grau de precisão satisfatório para as áreas de engenharia. Segundo SMITH (1990), uma das prioridades nas operações industriais provavelmente é o desenvolvimento de *solucionadores* (algoritmos computacionais) robustos para escoamentos tri-dimensionais de campos de escoamentos turbulentos em tanques de agitação, visando o detalhamento interno dos escoamentos. Entretanto, esse problema genérico é ainda difícil de tratar e requer extensas pesquisas para resolver as questões intermediárias que o compõe. Áreas de processos industriais afins, isto é, *tratamento de água, biotecnologia e engenharia ambiental*, são confrontadas com dificuldades similares, havendo por vezes pouco entendimento do processo físico envolvido. A colaboração interdisciplinar é, neste caso, muito benéfica e a dinâmica dos fluidos computacional torna-se útil para entender características importantes de um sistema e prever seu comportamento.

### 1.2.1. A UTILIZAÇÃO DO COMPUTADOR COMO FERRAMENTA DE ANÁLISE

BRAGA (1992) classifica duas condições em que a *previsão numérica* para soluções de dinâmica dos fluidos (ou mecânica dos fluidos) tem sido utilizada:

i) indicações importantes sobre o comportamento real dos fluidos em situações nas quais as dificuldades experimentais são grandes – como na interface gás-líquido;

ii) estudar e testar novos modelos ou leis físicas, na medida que os *resultados numéricos* podem ser fácil e velozmente obtidos e comparados com *resultados experimentais disponíveis*.

Os artigos e referências bibliográficas considerados de interesse para esta pesquisa enfatizam as investigações numéricas e experimentais de escoamentos turbulentos associados aos fenômenos de transporte. A busca das referências concentra-se em tanques cilíndricos. Destacam-se aqui os temas relacionados com o *transporte de grandezas escalares* (um aspecto inédito explorado neste trabalho foi a

utilização das ferramentas numéricas na previsão da transferência de gases através da interface gás-líquido, ou seja, *na superfície livre*).

A quantificação da transferência dos gases envolveu parâmetros físico-químicos, como a difusividade molecular do gás, solubilidade do gás (lei de Henry), viscosidade, temperatura do sistema; além de envolver parâmetros hidráulicos, como velocidade média, altura da coluna de água e propriedades geométricas do escoamento.

A grande quantidade de parâmetros e as dificuldades inerentes à solução de sistemas de equações não-lineares impedem, por enquanto, um tratamento teórico completo do problema. Assim, este estudo se coloca em paralelo com o uso dos métodos computacionais que emergiram, com bastante ênfase, principalmente nas três últimas décadas deste século (PERIC', 1985, PERIC' e SCHEUERER, 1988, e RODI, 1984). Desta forma, o computador surge como ferramenta útil para uma investigação detalhada e específica do problema de transferência interfacial gás-líquido.

Entretanto, segundo RANADE (1997b), a investigação numérica e os métodos de escolha para a modelagem dos escoamentos têm sido ordinariamente experimentais e semi-teóricos, tais como os estudos com traçadores. E a despeito de sua popularidade, esses métodos também apresentam uma limitação inerente: normalmente um conjunto de dados experimentais. E, portanto, a validade dos modelos tende a se restringir dentro da faixa experimental dos dados obtidos.

### **1.3. LOCALIZAÇÃO DO PRESENTE ESTUDO COM RELAÇÃO A ESTUDOS SIMILARES SOBRE TANQUES DE MISTURA**

Os estudos de RANADE *et al.* (1989a,b e 1992) e SMITH *et al.* (1997), foram considerados relevantes e como ponto de partida importante no contexto desse trabalho foram bastante referenciados, pois relacionam os resultados que dizem respeito à experimentação (geração de dados hidrodinâmicos, medidas de intensidades turbulentas, efeitos geométricos, etc) e simulações numéricas, envolvendo a utilização do modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ , e de condições de contorno no interior do tanque.

Segundo os referidos autores a aplicação dos conhecimentos relacionados à turbulência para entender o escoamento em tanques de agitação está em seu primeiro

estágio de desenvolvimento. Os autores comentam que algumas propostas gerais de códigos (algoritmos) de computação estão disponíveis (por exemplo, FLUENT, PHOENIX, FIAT, etc) para resolver escoamentos turbulentos em duas dimensões (2D) e três dimensões (3D), os quais podem ser adaptados para resolver escoamentos em tanques agitados. Entretanto, esses algoritmos são complexos e não são facilmente acessíveis para uso geral. Além disso, o tratamento da superfície livre não é tema facilmente encontrado na literatura. Em RANADE *et al.*, 1989<sup>a</sup> foi descrito os detalhes experimentais sobre o escoamento gerado pela turbina de pás planas inclinadas (*PTD-Pitched "Blad Turbines" Downflow*).

Na segunda parte do trabalho de RANADE *et al.* (1989b) descreve-se o desenvolvimento de um algoritmo computacional, FIAT (*Flow In Agitated Tanks*), especialmente feito para adequar necessidades de escoamentos em tanques agitados (de geometria cilíndrica), no qual se utilizou o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ . Embora não sejam fornecidos detalhes da modelação numérica a presente tese utiliza-se das indicações e direcionamentos ali sugeridos.

A simulação numérica foi feita neste tese usando os modelos mais simples de duas equações, ou seja, o modelo  $k-\varepsilon$  padrão. O maior inconveniente da modelagem de RANADE *et al.* (1989b) ou SMITH *et al.* (1997) é justamente a superfície livre, considerada como um contorno sólido. Conseqüentemente, existe a condição *de não deslizamento na mesma*, a qual pode influenciar drasticamente a determinação da velocidade resultante na superfície, que é um dos principais componentes para calcular o coeficiente de transferência de massa na interface ar-água. E, verificou-se que o processo de modelagem na interface ar-água necessita de maiores estudos.

#### 1.4. A TURBULÊNCIA COMO TEMA DO TRABALHO

A turbulência persiste como um dos maiores problemas teóricos e computacionais da dinâmica dos fluidos. Se fosse possível resolver equações de dinâmica dos fluidos 3D, dependente do tempo, para massa, momento e energia em uma faixa suficientemente ampla de tempo e espaço, a turbulência apareceria naturalmente na solução. Como a *faixa de escalas importantes é contínua e extensa* (tamanho e frequência dos turbilhões), não existe modo claro de separá-las. As abordagens para modelação de escoamentos turbulentos são geralmente inadequadas se elas são limitadas para uma pequena faixa de escalas ou se elas assumem que as escalas grandes e pequenas estão amplamente separadas.

As teorias estatísticas para a turbulência dividem a solução em escoamento *médio-temporal* e em *componente que flutua no tempo*. Os modelos de turbulência resultantes da abordagem estatística envolvem *conjuntos de equações de conservação com termos extras que representam as flutuações no sistema*. Assim, modelos relacionando estes termos extras para conhecer as novas quantidades devem ser postulados para *fechar* o conjunto de equações. Como esses modelos envolvem propostas empíricas, verifica-se que ainda há muito a ser feito no estudo da turbulência.

### 1.5. CONTEÚDO DA TESE

Nesta tese foi feito um estudo *via* elaboração de um algoritmo que engloba rotinas para quantificar a transferência de massa através da interface ar-água. Desta forma uma das etapas deste trabalho foi a elaboração de um algoritmo computacional para a simulação numérica do escoamento médio nos tanques. Ao algoritmo elaborado denominou-se TANK.FOR. Em todos os escoamentos simulados utilizou-se coordenadas cilíndricas e o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$  padrão. O método de discretização utilizado foi o de volumes finitos com arranjo da malha deslocada. A função de interpolação utilizada foi do tipo exponencial (potência) e o já referido algoritmo iterativo da família SIMPLE (SIMPLER) para implementação dos ciclos iterativos e acoplamento pressão-velocidade. Desta forma, obtiveram-se os campos de velocidade nas duas direções,  $U_r(\text{radial})$ , e  $W_A(\text{axial})$ , o campo de pressão, bem como os campos de energia cinética turbulenta, taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e, finalmente, a distribuição de viscosidade efetiva no tanque e os respectivos campos de concentração: tanto para processos de absorção de oxigênio quanto para os processos de dessorção gasosa de compostos orgânicos voláteis (COVs).

Uma vez alcançada a convergência e conseqüente solução do escoamento foi simulado o transporte do escalar com o acoplamento da equação uni-dimensional de transferência de massa e foram feitas as convenientes comparações com dados de experimentos da literatura para determinação de  $K$ , calculados numericamente (curvas de concentração versus tempo dentro de cada molécula computacional).

---

## II - OBJETIVOS

O presente trabalho teve como objetivo principal estudar escoamentos descendentes gerados por turbinas de pás planas inclinadas  $45^\circ$  (*PTD*), em tanques cilíndricos dotados de chicanas (baffles). Buscou-se quantificar a influência das características hidrodinâmicas do escoamento gerado nos processos de absorção e dessorção de gases que ocorrem na superfície do líquido. No estudo das características hidrodinâmicas foram consideradas as peculiaridades do campo de velocidade em partes críticas do tanque, ou seja, nas vizinhanças do impulsor (hélices ou turbinas), próximas às paredes laterais, eixo de simetria, fundo e superfície líquida.

O trabalho buscou quantificar os processos de troca na interface ar-água para comparar os resultados com um modelo unidimensional de transferência para os gases em questão. Especificamente, podem ser apresentados os seguintes objetivos:

- Gerar um algoritmo computacional (FORTRAN-90) para escoamentos turbulentos em tanques de mistura de geometria cilíndrica usando o modelo  $k-\varepsilon$  para a quantificação das grandezas relevantes.
- Inserir no algoritmo computacional uma rotina para a quantificação de campo escalar (massa para o caso turbulento).
- Modelar o contorno correspondente à interface ar-água, incluindo informações físicas encontradas na literatura e reproduzir, a partir dos cálculos, resultados de oxigenação e dessorção de gases já existentes.

---

### III - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

#### PREÂMBULO

Este capítulo foi subdividido em quatro temas relevantes, os quais serão relacionados entre si ao longo do texto. A **primeira parte** trata dos fundamentos de transferência de massa, ou seja, dos principais parâmetros físico-químicos e hidrodinâmicos relacionados com a transferência de massa gás-líquido, das equações de transporte, dos modelos clássicos, da técnica de traçadores gasosos e suas aplicações em escoamentos artificiais (tanques, aeradores, canais, reatores, etc.) e naturais (rios, correntes, lagos, mares, reservatórios, etc). A **segunda parte** trata da turbulência e seus principais modelos, mais precisamente o modelo de duas equações  $\kappa - \varepsilon$ , para resolver o problema de fechamento das chamadas tensões de Reynolds, que surgem do equacionamento turbulento. A **terceira parte** trata dos tanques de agitação e dos estudos relacionados com a hidrodinâmica e geometria do sistema turbulento, finalizando com uma breve alusão sobre os aeradores mecânicos e suas aplicações práticas. A **quarta parte** trata da geometria e dos métodos numéricos em escoamentos turbulentos em tanques de mistura, do Método de Volumes Finitos (MVF), das equações, da discretização das equações de transporte em coordenadas cilíndricas. Trata também da questão de acoplamento pressão-velocidade, condições de contorno e termos fonte, dos métodos e algoritmos da família SIMPLE, finalizando com algumas considerações da modelagem numérica de transferência de massa na interface ar-água e acoplamento das equações da hidrodinâmica às de um escalar (massa).

Os dados experimentais usados no presente trabalho foram obtidos de estudos experimentais encontrados na literatura da área, como CUNHA (1993), HSIEH (1993), MOMESSO (1996), BARBOSA (1989) e RAINWATER e HOLLEY (1983), e teóricos como os de SCHULZ *et al.* (1991, 1992 e 1993). Um dos equipamentos modelados no presente estudo foi construído por CUNHA (1993) e também utilizado por MOMESSO (1996), os quais executaram experimentos de transferência gasosa. Os detalhes do equipamento foram apresentados na introdução (figura 1.2).

Como já foi mencionado, as características dos fenômenos envolvidos nos tanques de agitação mostram-se complexas. Desta forma, os projetos deste tipo de equipamento têm sido baseados em dados experimentais e correlações empíricas

globais, obtidas em equipamentos semelhantes e em condições de operação próximas daquela de projeto (ZERBINI, 1992, SMITH, 1990, e RILLEY, 1988). Os referidos autores salientam ainda os problemas clássicos de mudança de escala entre uma planta piloto e uma unidade industrial, que pode levar a resultados não satisfatórios, pois as regras de mudança de escala normalmente utilizadas não são exatas devido a inter-relação e não linearidade dos fenômenos relevantes.

Por outro lado a análise numérica bi-dimensional do escoamento em tanques foi aqui conduzida no sentido de efetuar um estudo detalhado da hidrodinâmica desses sistemas, com o intuito de melhor quantificar os processos de troca na superfície do líquido. Alguns exemplos de análises bi-dimensionais podem ser vistos em GOSMAN *et al.* (1969), DOORMAAL e RAITHY (1984), GOSMAN *et al.* (1985), BOTELHO e MOREIRA (1991), ZHU (1991), ZERBINI (1992). Espera-se que informações sobre o escoamento, obtidas a partir do estudo numérico possam ser úteis na elaboração de melhores equipamentos, ou como no presente caso, no entendimento mais detalhado dos fenômenos interfaciais em tanques de mistura. Uma interessante discussão sobre os mecanismos de transferência interfacial em superfícies móveis e “imóveis” em regime não-permanente foi apresentada por HANRATY (1991).

A modelagem hidrodinâmica neste trabalho foi realizada em regime estacionário e em coordenadas cilíndricas, porém o processo de transferência de massa na interface ar-água é considerado essencialmente não-permanente (concentração variando no tempo). Por outro lado, um dos mais difíceis aspectos relacionados com a modelagem de turbulência é o estabelecimento de condições de contorno para algumas variáveis como a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta,  $\epsilon$ , na superfície livre. Esse fato faz com que condições de contorno sugeridas por vários autores como, por exemplo, LAUNDER e SPALDING (1972), RODI (1980), LAU e KRISHNAPPAN, NAOT e RODI (1983), sejam ainda muito empíricas. Esta dificuldade persiste mesmo em situações de escoamento uniforme em canais abertos (EIGER, 1997).

Associado a estes fatores inerentes ao aspecto de programação, está também aqueles relacionados à própria questão da mecânica dos fluidos, a qual é especialmente rica em não-linearidades. E também rica em misturas de equações diferenciais hiperbólicas e elípticas, em singularidades matemáticas de várias ordens e em problemas com condições de contorno desconhecidas. Desta forma, a simulação numérica da dinâmica dos fluidos está então mais próxima da experimentação do que

da dinâmica dos fluidos teórica propriamente dita. O desempenho de cada cálculo em um computador lembra a performance de um experimento físico, em que o analista “provoca” as equações e espera para ver o que acontece, somente como um experimentador físico o faz (ROACHE, 1982).

Mas para o melhor entendimento dos vários aspectos que serão abordados, doravante, foi preciso compartimentalizar os principais pontos a serem estudados, como a seguir.

### 3. FUNDAMENTOS DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA NA INTERFACE AR-ÁGUA

#### 3.1 UMA VISÃO DA ABRANGÊNCIA DO TEMA

O entendimento do mecanismo de transferência de massa através da interface gás-líquido é de grande importância em processos industriais e ambientais, sendo o entendimento do escoamento dos fluidos envolvidos fundamental nesses processos (DAVIES *et al.*, 1963; DAVIES, 1972; HINES e MADDOX, 1985). O comportamento do escoamento no interior de um sistema ou equipamento qualquer, onde ocorre o processo da transferência, está intimamente relacionado com a taxa de transferência interfacial da substância em questão e com a eficiência do equipamento.

Dentre os processos ambientais que envolvem transferência interfacial de massa podem ser destacados os de transferência de gases através da interface ar-água de corpos naturais de água (rios, lagos, estuários, oceanos, etc), os quais são críticos nos ciclos bio-geoquímicos naturais de materiais, como o transporte e transformação de poluentes no ambiente, no consumo de oxigênio nesses corpos de água naturais. Uma gama de trabalhos demonstram isso, como STREETER *et al.* (1925), STREETER *et al.* (1936), TSIVOGLU *et al.* (1968), TACKSTON e KRENKEL (1969a), LISS e SLATER (1974), YOTSUKURA *et al.* (1983), RATHBUN e TAY (1984), HOLLEY *et al.* (1984), PARKER e GAY (1987), McCUTCHEON *et al.* (1989), KILPATRIK *et al.* (1989), HOLLEY *et al.* (1991), JIRKA (1991), ROLDÃO (1991), LUNG (1993), CIRPKA *et al.* (1993), BARBOSA *et al.* (1995), SIQUEIRA (1996) e outros. Neste contexto, dois fenômenos foram sempre ressaltados: a reaeração (absorção do oxigênio pela atmosfera) e a dessorção de gases ou compostos orgânicos voláteis ou semi-voláteis (respectivamente, COVs ou COSVs, conforme terminologia usual) presentes em corpos líquidos, especificamente a água.

Nos processos ou sistemas artificiais a transferência de gases pode ocorrer nas **estações de tratamento de água** como indicados por HANEY (1954), DOBBINS (1956), KOZINSKY *et al.* (1966), KALINSKY (1968), ALÉM S<sup>o</sup> (1981), LJUBISAVLJEVICK (1984), METCALF *et al.* (1985), AQUAJET (S/D), CAKICI *et al.* (1995); em **tanques de mistura ou canais**: BENETH e RATHBUN (1972), RATHBUN *et al.* (1978), RAINWATER e HOLLEY (1983), ROBERTS e DÄNDLIKER (1983), ROBERTS (1984), BARBOSA (1989), ARRUA *et al.* (1990), BARBOSA *et al.* (1990), JIRKA e CHU (1993); **bioreatores**: FREIRE (1985), BOYSAN *et al.* (1988), SAEKI *et al.* (1992), **represas e lagos**: KOJIMA (1988), **absorvedores ou fermentados**: MEER *et al.* (1992), TRÄGÅRDTH (1988); **estruturas hidráulicas**: TASK COMMITTEE ON GAS TRANSFER (1991), McDONALD e GULLIVER (1991), etc. RASHID *et al.* (1991). Essas referências dão uma forte ênfase sobre a necessidade de estudar o mecanismo de transferência, o qual necessita ser bem entendido para posterior aplicação nos projetos de equipamentos.

Ambos os processos, absorção e dessorção, são governados por agentes físico-químicos (propriedades das substâncias envolvidas) e físicos como pressão, temperatura e tipo de escoamento (notadamente a turbulência). A reaeração tem sido estudada amplamente em corpos de água e sua importância está relacionada com as necessidades modernas de tratamento de águas de abastecimento, residuárias e estudos de qualidade da água (SIQUEIRA, 1996; McCUTCHEON *et al.*, 1989 e LUNG 1993).

O processo de dessorção de gases e volatilização de substâncias orgânicas tóxicas, que podem estar presentes, principalmente em corpos de água residuárias, em última análise também pode ser considerado como um fenômeno autodepurativo e também necessita de estudos mais aprofundados. Alguns desses estudos podem ser indicados como os de MACKAY *et al.*, (1975), COHEN *et al.*, (1978); WILCOCK (1984a,b); ATLAS *et al.*, (1982), MACKAY *et al.*, (1983). Vê-se, portanto, que o tema é objeto de estudos em número, os quais indicam a necessidade de esforço no entendimento dos mecanismos básicos de transferência.

Para ilustrar a importância deste tipo de estudo dentro da nova realidade, podemos citar o caso de uma estação de tratamento de água convencional (ETAc) que, por ser convencional, não é capaz de tratar substâncias orgânicas tóxicas (como benzeno, PCBs, etc) caso elas estejam presentes na água. Alguns destes compostos geralmente são altamente tóxicos (teratogênicos, carcinogênicos ou mutagênicos) já em níveis muito baixos. Verificando algumas normas, evidencia-se a necessidade de se estudar os processos de dessorção e como tais substâncias podem ser eliminadas da

água (ver Classificação das Águas - CONAMA: Resolução nº 20, de 18 de junho de 1986; e a Portaria nº 36/GM, 19 de janeiro de 1990, de Normas e Padrão de Potabilidade de Águas destinadas ao Consumo Humano, e outras).

Neste contexto, segundo LUZ (1996), são lançadas 200 mil toneladas de agrotóxicos por ano em terras brasileiras, os quais podem ser carreados pelas águas superficiais para os corpos de água de córregos, rios e lençóis freáticos próximos das áreas contaminadas. O problema de descontaminação dessas águas é sério e as perspectivas de despejos são ainda preocupantes. O referido autor afirma que só em 1995 foram gastos 1,5 bilhões de dólares com tais produtos, cujas vendas aumentaram 50% em cinco anos. Além disso, há perspectivas de que o novo acordo do Mercosul de comercialização desses produtos que, por sua vez, contraria a Lei Nacional de Agrotóxicos, favoreça o uso indiscriminado desses compostos no país.

### 3.2 SISTEMAS E PROCESSOS SIMULADOS

A literatura consultada permitiu concluir pela conveniência do estudo dos fenômenos de reaeração (absorção de oxigênio) e dessorção de gases ou substâncias voláteis e semi-voláteis (dessorção) conjuntamente, uma vez que ambos os fenômenos ocorrem simultaneamente e são governados pelas mesmas condições do escoamento.

Tal fato também conduziu ao estudo numérico desses fenômenos de troca *via* simulação de tanques de mistura hidrodinâmica, pois estes apresentam características construtivas e experimentais convenientes para determinar a discretização espacial e temporal. Em condições controladas de agitação e temperatura, os tanques podem simular situações hidrodinâmicas em que ambos os processos estejam ocorrendo, com o intuito de obter parâmetros de troca específicos que possam ser utilizados nos modelos de transferência de massa ou em modelos de qualidade de água, como por exemplo os estudos com traçadores em corpos de água naturais ou artificiais. Assim, o seu uso como ponto de partida para a simulação numérica é uma decorrência natural de suas vantagens.

### 3.3 LEI DE FICK DA DIFUSÃO MOLECULAR

BARBOSA (1997) descreve os passos tradicionais do estudo de difusão de agentes passivos. Primeiramente define-se um constituinte genérico, ou um soluto denominado de traçador, qual é o agente passivo propriamente dito, ou seja, a sua presença no corpo de água não provoca alterações nas características hidrodinâmicas do escoamento. A formulação é consequência da aplicação do balanço de massa sobre uma porção do fluido pelo qual o traçador é transportado. Usualmente a formulação de difusão molecular serve como base para as análises subsequentes da difusão turbulenta, por analogia.

O modelo matemático usado para representar o processo de difusão, ou seja, o processo pelo qual a matéria é transportada de uma parte a outra por consequência apenas de movimentos moleculares randômicos, foi desenvolvido por Fick, em 1855. Segundo Fisher *et al.*<sup>1</sup> *apud* BARBOSA (1997), Fick formulou uma teoria que descreve o processo por difusão em analogia aos processos representados pelas leis de Fourier e Ohm, já conhecidas, para a difusão de calor e eletricidade, respectivamente, na forma:

$$J = -\rho D_i \frac{\partial w_i}{\partial y} = -D_i \frac{\partial C}{\partial y} \quad (3.1a)$$

onde  $J$  = fluxo de massa por unidade de área (densidade de fluxo)  
 $\rho$  = massa específica do fluido  
 $w_i$  = fração mássica,  
 $D_i$  ou  $D_{AB}$  = coeficiente de Difusão molecular ou difusividade molecular,  
 $dw_i/dy$  = gradiente de concentração na direção  $y$  em termos de fração mássica,  
 $dC/dy$  = gradiente de concentração na direção  $y$  em termos de massa.

A grandeza densidade de fluxo,  $J$ , é de natureza vetorial e, para o caso multidimensional, podemos representar a equação da difusão na forma:

$$\vec{J} = -\rho D_i \frac{\partial w_i}{\partial y} = -D_i \nabla C \quad (3.1b)$$

<sup>1</sup> FISHER, H.B., IMBERGER, J. LIST, E., J.KOH, R.C.Y. e BROOKS, N. H., (1979). *Mixing in Inland and Coastal Waters*. N. York. Academic Press.

onde  $\nabla C =$  gradiente de concentração nas três dimensões, com componentes  $J_x$ ,  $J_y$ ,  $J_z$ , num sistema de coordenadas cartesianas, e  $\nabla$  é o operador gradiente. Daqui em diante serão considerados sinônimos os índices  $i$  e  $AB$ , em  $D$ , indicando, a difusão do componente  $A$  no solvente  $B$ .

HELOU (1994) menciona a difusão como um movimento molecular aleatório que ocorre em todas as formas de matéria, sendo que nos sólidos o processo é de modo geral muito mais lento que nos líquidos e gases. HELOU (1994) descreve ainda que a ciência atômica tem demonstrado que o conceito de matéria em uma condição estática é relativo. Numa temperatura qualquer, acima do zero absoluto, as moléculas individuais de uma substância movem-se incessantemente e de forma aleatória, independentemente uma das outras. Colisões frequentes ocorrem entre as partículas, de modo que a trajetória de uma única partícula é um *zigzag*. Entretanto as partículas em difusão possuem um fluxo, cujo sentido de propagação vai de locais de maior para os de menor concentração. As leis de difusão (equações 3.1a-b) mostram precisamente a relação fluxo de uma substância difundida e o gradiente de concentração responsável por este fluxo.

A quantificação de  $D_{AB}$  é, por vezes, considerada mais complexa do que as descrições análogas para os coeficientes de transferência moleculares de quantidade de movimento e energia que ocorrem em um componente. Uma vez que a transferência de massa ocorre em misturas<sup>2</sup>, sua avaliação deve envolver a análise do efeito de cada componente (WELTY 1984, *apud* MOMESSO, 1996).<sup>3</sup>

Tem-se também a segunda lei de Fick, decorrente da aplicação do princípio da conservação da massa, que pode ser escrita em função de coordenadas cartesianas ( $x,y,z$ ) na forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{AB} \nabla^2 C = D_{AB} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (3.2)$$

onde  $\nabla^2$  é o operador laplaciano. Na equação 3.2 considerou-se haver isotropia para a difusão.

<sup>2</sup> A transferência de massa também ocorre em um meio com único componente – “autodifusão”.

<sup>3</sup>WELTY, J. R. (1984) - *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer* - 2ª Ed. New York, John Wiley e Sons, Inc. 803 p.

### 3.4 DIFUSÃO ADVECTIVA

Neste caso o meio e o constituinte passam a ter velocidade relativa não-nula e admite-se que o agente passivo seja transportado ou advectado com a mesma velocidade do meio que o contém. A advecção é tratada como um processo de transporte distinto da difusão, mas ambos têm efeitos aditivos. Portanto, acrescentando-se os termos advectivos à equação de Fick, tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \cdot \nabla C = \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) = D \nabla^2 C \quad (3.3)$$

Esta é a equação normalmente utilizada na simulação do transporte de constituintes (agentes passivos) sujeitos à efeitos combinados de difusão e advecção. EIGER (1991), HELOU (1994) e BARBOSA (1997) apresentam soluções analíticas simplificadas, à despeito das limitações existentes para os campos de velocidade<sup>4</sup>.

---

<sup>4</sup> Em escoamentos com velocidade constante (que pode ser uma boa aproximação em alguns casos) a equação 3.3 é linear e, como consequência, tem solução. Os contornos definem, então, a forma da solução.

### 3.5 O COEFICIENTE DE DIFUSÃO MOLECULAR GÁS-LÍQUIDO ( $D_{AB}$ )

O coeficiente de difusão molecular,  $D_{AB}$ , quantifica a “facilidade” com que certo elemento ou composto se difunde através de outro elemento ou composto. No presente trabalho interessam os coeficientes de difusão de gases dissolvidos em água.

O coeficiente de difusão pode ser obtido experimentalmente através de uma aplicação conveniente da lei de Fick, dependendo tanto da temperatura,  $T$ , como da pressão,  $P$ , bem como da composição das substâncias envolvidas (como a presença de sais dissolvidos na água). KING *et al.* (1995), descrevem as duas expressões mais comumente usadas para estimar o coeficiente de difusão  $D_{AB}$ , ou seja, aquela proposta por Wilke-Chang (1955) *apud* PERRY (1985) e REID *et al.* (1977) e aquela proposta por HAYDUK e LAUDIE (1974) *apud* KING *et al.* (1995), representadas pelas equações 3.4 e 3.5, respectivamente:

$$D_{AB} = \frac{7,4 \cdot 10^{-8} (\Phi M_B)^{\frac{1}{2}} T}{\mu_B \cdot V_A^{0,6}} \quad (3.4)$$

$$D_{AB} = \frac{13,26 \cdot 10^{-5}}{\mu_B^{1,4} \cdot V_A^{0,589}} \quad (3.5)$$

$\Phi$  é um “fator de dissociação” adimensional, igual a 2,6 para a água,  $M_B$ , é o peso molecular do solvente  $B$ ,  $T$  é a temperatura em Kelvin,  $\mu_B$  é a viscosidade dinâmica do solvente (centi-Poise), e  $V_A$  é o volume molar de um mol do líquido puro no ponto de bolha ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ) do soluto, representado pelo índice  $A$ .  $D_{AB}$  é calculado em  $\text{cm}^2/\text{s}$ .

A principal diferença entre as duas equações é a inclusão da temperatura como parâmetro explícito na expressão de Wilke-Chang, enquanto que a dependência da temperatura de  $D_{AB}$  é expressa somente em termos de  $\mu_B$  na relação de Hayduk e Laudie. Observa-se que em ambas as equações o único parâmetro físico que não é propriedade do solvente é o volume molar do soluto. Em soluções aquosas diluídas o erro médio da equação 3.4 é da ordem de 10% e no máximo de 30% e em soluções não-aquosas diluídas é da ordem de 25 a 50% (PERRY, 1985). A expressão de Wilke-Chang é a mais utilizada na literatura.

Na tabela 3.1 são mostrados valores da difusividade molecular de alguns dos gases cujos processos de transporte foram simulados neste trabalho, em função de algumas temperaturas fixas de interesse.

**Tabela 3.1:** Valores de difusividades moleculares estimados para os gases metano, etileno, acetileno, propano e oxigênio<sup>5</sup>.

SUBSTÂNCIA	$V_C$ ( $\text{cm}^3/\text{g-mol}$ )	$V_A$ ( $\text{cm}^3/\text{g-mol}$ )	TEMPERATURA ( $^{\circ}\text{C}$ )	$D_i$ ( $\text{m}^2/\text{s}$ ) $\times 10^{-9}$
METANO CH <sub>4</sub>	99.00	35.18	15	1.504
			20	1.733
			25	1.980
			30	2.246
ACETILENO C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	113.00	40.41	15	1.384
			20	1.595
			25	1.822
			30	2.066
ETILENO C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	129.00	46.42	15	1.273
			20	1.467
			25	1.676
			30	1.901
PROPANO C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	203.00	74.66	15	0.958
			20	1.103
			25	1.261
			30	1.430
OXIGÊNIO O <sub>2</sub>	73.40	25.71	15	1.815
			20	2.092
			25	2.390
			30	2.710

O volume molar  $V_A$  a ser utilizado nas equações 3.4 e 3.5 é calculado a partir do volume crítico  $V_C$  ( $\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ), conforme a equação 3.6, abaixo:

<sup>5</sup> Os dados das difusividades moleculares dos gases,  $D_{AB}$ , foram obtidos a partir de uma sub-rotina denominada DAB, a qual faz do programa principal TANK.FOR, um dos objetivos principais deste trabalho. Os valores de difusividade da tabela 3.1 foram utilizados para calcular os parâmetros adimensionais de transporte obtidos nos experimentos de CUNHA (1993) e MOMESSO (1996). O mesmo foi feito para 21 compostos orgânicos estudados por HSIEH *et al.* (1993a) e 1 composto por BARBOSA (1989).

$$V_A = 0,285.V_c^{1,048} \quad (3.6)$$

Em REID *et al.* (1977), são tabelados os valores de várias propriedades físico-químicas inclusive  $V_c$ , para que se possa estimar  $V_A$  e em consequência  $D_{AB}$ . É preciso frisar, todavia, que a equação 3.6 não é precisa para gases com baixos pontos de ebulição, tais como He, H<sub>2</sub>, Ne, Ar, HCN e PH<sub>3</sub>.

As principais influências de  $D_{AB}$  sobre os coeficientes de troca, denominados por  $K_i$ , serão discutidas mais adiante, nos modelos conceituais clássicos e nos modelos mais recentes existentes na literatura. Referências de interesse acerca do tema são: KING *et al.* (1995), MACKAY *et al.* (1991), HINES e MADDOX (1985), PERRY (1985), LEDWEL (1984) e REID *et al.* (1977).

### 3.6 A CONSTANTE DA LEI DE HENRY PARA COMPOSTOS ORGÂNICOS NA ÁGUA

Segundo YAWS *et al.* (1991), a constante de Henry,  $H_e$ , é ideal para estimar a concentração de um soluto próximo à interface líquido-vapor de uma solução diluída, permitindo o cálculo imediato da concentração de hidrocarbonetos e outros compostos orgânicos resultantes de lançamentos acidentais em correntes de água. Em particular, nos estudos de impacto ambiental, a constante da lei de Henry (ou simplesmente constante de Henry) é útil na determinação de cargas de substâncias químicas na água. Textos que apresentam algumas considerações sobre a constante de Henry são ADENEY e BECKER (1919), MIYAMOTO (1932a,b), McAULIFFE (1966), MACKAY *et al.* (1984), WILCOCK (1984a,b), RATHBUN e TAY (1981), RATHBUN e TAY (1982), RATHBUN e TAY (1986), RATHBUN e TAY (1987), MACKAY (1991), SMITH *et al.* (1980), KUO (1984), EISENREICH *et al.* (1991) entre outros.

O estudo da constante de Henry,  $H_e$ , é comumente usado para quantificar os processos de absorção e remoção de substâncias químicas da água, principalmente nas operações unitárias. Tais operações são empregadas para remover COVs que, por exemplo, contaminam águas subterrâneas. No estudo de YAWS *et al.* (1991), são apresentados métodos simples para estimar a concentração de 232 hidrocarbonetos e 130 substâncias orgânicas na interface ar-água, através de  $H_e$ .

Acerca da presença de COVs na água, DI BERNARDO (1993), descreve algumas implicações de constituintes orgânicos, oriundos de três fontes principais:

quebra de moléculas de substâncias orgânicas naturais; atividades antrópicas; reações que ocorrem nas estações de tratamento de água. De certa forma, as três fontes podem conduzir a interações diversas entre estas substâncias presentes na água, a exemplo das ETAs (Estações de Tratamento de Água), formando trihalometanos e outros compostos prejudiciais à saúde pública. O referido autor conclui sua discussão sobre a real possibilidade de presença de COVs em corpos de água geralmente em locais próximos às comunidades rurais e as altamente industrializadas ou urbanizadas (ver LUZ, 1996), as quais podem estar consumindo água com suas características físicas, químicas e biológicas com concentrações superiores àquelas máximas permitidas por lei (Resolução CONAMA nº 20/1986, Portaria GM nº 36/1990, as quais prevêem tratamentos específicos para a remoção de substâncias ou elementos químicos da água). Assim, vê-se novamente a necessidade de efetuar estudos básicos, relacionados com conceitos fundamentais em físico-química, para aplicar em soluções propostas no nível de engenharia.

A constante de Henry pode ser definida como nas equações 3.7(a-c), e aplicada para compostos orgânicos que são líquidos em temperatura ambiente e pressão atmosférica, da seguinte forma:

$$H_e = \frac{1}{x_{i,\text{água}}} p_{i,\text{sat}} \quad (\text{LÍQUIDOS PARCIALMENTE SOLÚVEIS NA ÁGUA}) \quad (3.7a)$$

$$H_e = \gamma_{i,\infty} \cdot p_{i,\text{sat}} \quad (\text{LÍQUIDOS MISCÍVEIS NA ÁGUA}) \quad (3.7b)$$

$$H_e = \frac{1 - y_{H_2O}}{x_{i,\text{água}}} \quad (\text{GASES PARCIALMENTE SOLÚVEIS NA ÁGUA}) \quad (3.7c)$$

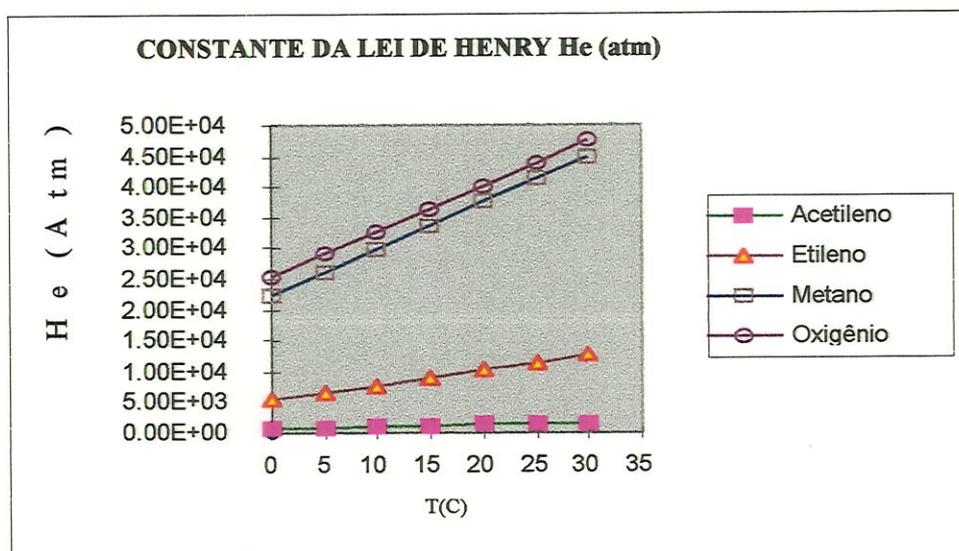
$\gamma_i$ ,  $x_{i,\text{água}}$  e  $p_i$  são o coeficiente de atividade, a fração molar (em níveis muito baixos na água,  $x_i \ll 1$ ) do componente  $i$  na água e a pressão de vapor saturado do componente  $i$ , respectivamente.  $\gamma^\infty$  é um coeficiente de atividade de diluição “infinita” e  $y_{H_2O}$  é a fração molar de água na fase de vapor em condições normais do ambiente (CNTp).

A literatura apresenta muitos estudos específicos para buscar subsídios sobre o entendimento dos mecanismos de transferência de substâncias orgânicas na água. Em tanques de mistura (tanto em batelada como pistão) podemos citar MOMESSO (1996), CUNHA (1993), HSIEH *et al.* (1993), BARBOSA (1989), RATHBUN e TAY (1987a), WILCOCK (1984a), MATTER-MÜLLER (1981); RATHBUN e TAY

(1980), RAINWATER e HOLLEY (1983), ROBERTS e DANDINKLER (1983), ROBERTS (1984), DILLING (1977), ATLAS *et al.* (1982), HANNEY (1954); em **correntes naturais**: YOTSUKURA *et al.* (1983), WILCOCK (1984b), RATHBUN e TAY (1987b), RATHBUN e TAY (1982), McCUTCHEON (1989), CIRPKA *et al.* (1993), BARBOSA e GIORGETTI (1995), em **canais**: RATHBUN e TAY (1986), MACKAY e YEUN (1983), RATHBUN e TAY (1983), CONWAY e SPIEGEL (1984), COHEN e MACKAY (1978), MACKAY e LEINONEN (1975); em **estuários** LUNG (1993); em **oceanos**: LISS e SLATER (1974); e em **laboratório**: McAULIFF (1966) e outros.

Trabalhos adicionais sobre a constante de Henry que podem ser indicados são os de MACKAY e SHIU (1984), LINCOFF e GOSSET (1984), RATHBUN e TAY (1984), IVERFELD e LINDQUIST (1984), O'CONNOR (1984), KUO (1984), MACKAY *et al.* (1991), EISENREICH *et al.* (1991), PLATE *et al.* (1995) e RIDAL *et al.* (1995).

A figura 3.1 permite visualizar a ordem de grandeza de  $H_e$  e a sua variação com a temperatura para algumas substâncias, cujas transferências entre ar e água são avaliadas neste trabalho.



**Figura 3.1:** Variação da constante de Henry,  $H_e$  (atm), com a temperatura. Fonte de dados: PERRY (1985).

### 3.7 DIFUSÃO TURBULENTA

Na maioria dos casos práticos, o escoamento com o qual tratamos é turbulento. Como foi mencionado, o tratamento considerado para a difusão molecular serve de base para as analogias doravantes apresentadas.

Nos escoamentos turbulentos as características hidrodinâmicas apresentam relevantes componentes randômicas, que lhes dão um caráter de desorganização, sendo importantes para o comportamento da concentração do traçador em um escoamento turbulento (BARBOSA, 1997). HELOU (1994) comenta que a difusão turbulenta é, de alguma forma, bastante similar à difusão molecular em fluidos estáticos. A difusão turbulenta é um movimento aleatório de pequenas porções de fluidos, denominados de turbilhões, assim como a difusão molecular é movimento aleatório de moléculas.

A descrição de uma variável turbulenta em um dado ponto do espaço é geralmente feita a partir do modelo de Reynolds, pelo qual a mesma é representada pela superposição de uma flutuação turbulenta ao seu valor médio temporal, na forma (HINZE, 1959):

$$C = \bar{C} + C' \quad (3.8)$$

onde  $C$  = valor instantâneo da concentração,  
 $\bar{C}$  = valor médio temporal da concentração  $C$ ,  
 $C'$  = flutuação turbulenta da concentração  $C$  em torno de  $\bar{C}$ .

Semelhantemente para um componente no campo de velocidade  $U$ , tem-se:

$$U = \bar{U} + U' \quad (3.9)$$

onde  $U$  = valor instantâneo da velocidade,  
 $\bar{U}$  = valor médio temporal da velocidade  $U$ ,  
 $U'$  = flutuação turbulenta da velocidade  $U$  em torno de  $\bar{U}$ .

Portanto, acrescentando-se os termos de flutuação à equação 3.3, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(C+C')}{\partial t} + (\bar{U}+U') \frac{\partial(\bar{C}+C')}{\partial x} + (\bar{V}+V') \frac{\partial(\bar{C}+C')}{\partial y} + (\bar{W}+W') \frac{\partial(\bar{C}+C')}{\partial z} = \\ = D \left( \frac{\partial^2(\bar{C}+C')}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\bar{C}+C')}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(\bar{C}+C')}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Neste trabalho, faremos uso da variável genérica,  $\Phi$ , para simbolizar a variável que está sendo transportada. Assim, temos a equação genérica abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial t} + (\bar{U}+U') \frac{\partial(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial x} + (\bar{V}+V') \frac{\partial(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial y} + (\bar{W}+W') \frac{\partial(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial z} = \\ = D \left( \frac{\partial^2(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(\bar{\Phi}+\Phi')}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Dividindo-se ambos os membros da equação acima por  $\Delta t$  e integrando num intervalo de tempo  $\Delta t$ , definido entre os extremos de integração  $t$  e  $t^* = t + \Delta t$ , e finalmente levando-se ao limite quanto  $\Delta t$  tende para zero, temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t^*} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\Phi} + \Phi') dt &= \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{\Delta t} \left( \int_t^{t^*} \bar{\Phi} dt + \int_t^{t^*} \Phi' dt \right) \right] = \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial t}, \text{ pois } \int_t^{t^*} \Phi' dt = 0 \\ \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t^*} (\bar{U} + U') \frac{\partial}{\partial x} (\bar{\Phi} + \Phi') dt &= \frac{1}{\Delta t} \left( \int_t^{t^*} \bar{U} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} dt + \int_t^{t^*} \bar{U} \frac{\partial \Phi'}{\partial x} dt + \int_t^{t^*} U' \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} dt + \int_t^{t^*} U' \frac{\partial \Phi'}{\partial x} dt \right) = \\ &= \frac{1}{\Delta t} \left( \bar{U} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} \int_t^{t^*} dt + \bar{U} \frac{\partial}{\partial x} \int_t^{t^*} \Phi' dt + \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} \int_t^{t^*} U' dt + \int_t^{t^*} U' \frac{\partial \Phi'}{\partial x} dt \right) \\ &= \bar{U} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} + \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t^*} U' \frac{\partial \Phi'}{\partial x} dt = \bar{U} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} + \bar{U} \frac{\partial \Phi'}{\partial x} \\ &\quad \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\bar{\Phi} + \Phi') dt = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (3.12)$$

As médias dos termos de flutuação (com apóstrofo) no tempo são nulas. Unindo as equações 3.11 e 3-12 resulta:

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} + \bar{V} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial y} + \bar{W} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial z} = D \left( \frac{\partial^2 \bar{\Phi}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Phi}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{\Phi}}{\partial z^2} \right) - \left( \frac{\partial \overline{U'\Phi'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{V'\Phi'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{W'\Phi'}}{\partial z} \right) \quad (3.13)$$

Pode-se observar pela equação acima que o termo genérico médio,  $\bar{\Phi}$ , é transportado devido à velocidade média, difusão molecular assim como também sofre influência dos gradientes espaciais de valores médios de produtos de flutuações turbulentas. Neste último caso, as flutuações imprimem advecção turbulenta ao termo genérico, que no caso, pode ser um constituinte, de concentração  $C$ , de velocidade  $U$ ,  $V$  ou  $W$ , energia cinética,  $k$ , ou taxa de dissipação de energia cinética,  $\varepsilon$ , ou mesmo a pressão  $P$ .

Supondo que as flutuações turbulentas tenham caráter difusivo, uma vez que a advecção turbulenta possui média temporal nula, é conveniente postular-se que o transporte advectivo turbulento seja descrito também por uma lei de difusão análoga à primeira lei de Fick, ou seja, o fluxo associado às flutuações turbulentas possa ser proporcional ao gradiente da variável genérica  $\bar{\Phi}$ . Podemos então escrever:

$$\overline{U'\Phi'} = -v_{t,x} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x}, \quad \overline{V'\Phi'} = -v_{t,y} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial y}, \quad \overline{W'\Phi'} = -v_{t,z} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial z}. \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial t} + \bar{U} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} + \bar{V} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial y} + \bar{W} \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (D_m + v_{t,x}) \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ (D_m + v_{t,y}) \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ (D_m + v_{t,z}) \frac{\partial \bar{\Phi}}{\partial z} \right] \quad (3.15)$$

$v_{t,x}$ ,  $v_{t,y}$ ,  $v_{t,z}$  são coeficientes de difusão turbulentos. De acordo com o sentido físico de  $\bar{\Phi}$ , estes coeficientes assumem também sentidos físicos diferentes.

Da mesma forma, a equação de transporte para uma variável genérica,  $\bar{\Phi}$ , sob estas hipóteses pode ser escrita, em coordenadas cilíndricas (uma representação conveniente para este trabalho), omitindo-se por conveniência a barra de média da variável  $\bar{\Phi}$ , como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r U \Phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} (\rho V \Phi) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho W \Phi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \Gamma_{\Phi,eff} r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\Gamma_{\Phi,eff}}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\Phi,eff} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + S_{\Phi} \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde  $\Gamma_{\Phi,eff}$  denota um coeficiente de troca turbulento incluindo a contribuição molecular e  $S_{\Phi}$ , denota a taxa volumétrica de crescimento ou decaimento de  $\Phi$  devido às fontes internas e externas, as quais serão definidas convenientemente em capítulos subseqüentes de acordo com proposições de RANADE *et al.* (1989b) e SMITH (1997).

O coeficiente  $\Gamma_{\Phi,eff}$  forma parte da ligação entre o escoamento médio e a equação de turbulência e também é definido em termos de uma viscosidade efetiva  $\mu_{\Phi,eff}$  e o número de Prandtl (Pr) ou Schmidt (Sc),  $\sigma_{\Phi}$ . A viscosidade efetiva é dada por:

$$\mu_{\Phi,eff} = \rho \nu_t + \mu \quad (3.17a)$$

onde

$$\nu_t = \frac{C_{\mu} k^2}{\varepsilon} \quad (3.17b)$$

é a viscosidade cinemática aparente da turbulência, a qual não é uma propriedade de estado do fluido, mas depende do escoamento, tornando necessário o desenvolvimento de modelos para que se possa avaliá-la e  $C_{\mu} = 0.09$  (BOTELHO e MOREIRA, 1991).

### 3.8 MODELOS CLÁSSICOS DE TRANSFERÊNCIA DE GASES NA INTERFACE AR-ÁGUA

Como foi dito anteriormente, na maioria dos casos de importância prática a interface ar-água está submetida a escoamento em regime turbulento e o transporte através da interface gás-líquido pode ser influenciado tanto pelo lado do líquido quanto pelo lado do gás. As resistências à troca de gases na interface dependem, como será visto adiante, da ordem de grandeza da constante de Henry,  $H_e$ . Para gases pouco solúveis, como os estudados neste trabalho, o transporte através das interfaces ar-água é influenciado mais pelo escoamento do líquido próximo à superfície do que pelo comportamento da fase gasosa. Assim, a principal tarefa dos engenheiros da área tem sido ligar a taxa de transferência à parâmetros de escoamento do líquido.

As tentativas de modelar os processos interfaciais fizeram surgir diversos modelos de transferência de massa na interface gás-líquido, com vários níveis de

complexidade. A maioria desses modelos possui simplificações que derivam de hipóteses adotadas para o mecanismo de transporte (em forma de constantes ou funções) de origem empírica ou semi-empírica. Isto decorre do fato de os detalhes físicos da estrutura turbulenta próxima à superfície não serem suficientemente conhecidos.

De acordo com SCHULZ (1992) quando estudamos os processos interfaciais a partir dos modelos conceituais existentes, deparamos com algumas dificuldades de descrição da interface, decorrentes de nossas limitações para visualizá-la e das conseqüentes simplificações que impomos ao modelo criado. Desta forma, sempre que utilizamos uma expressão matemática para exprimir o comportamento da variável considerada relevante, estamos apenas reproduzindo a tendência gerada pelo modelo. Embora este fato ocorra em todas as áreas da ciência, por vezes o mesmo não é reconhecido, produzindo expectativas falsas acerca do comportamento real do sistema físico.

Em processos de transferência na interface gás-líquido, três pontos de vista básicos para a descrição dos processos junto à superfície podem ser extraídos da literatura da área, que são: a) Teoria dos Dois Filmes (LEWIS e WHITMAN, 1924), b) Teoria de Penetração - Renovação Superficial (HIGBIE, 1935 e DANKWERTS, 1951) e c) Teoria de Altas Agitações (KISHINEVSKY, 1955 e KISHINEVSKY e SEREBRIANSKY, 1955).

De acordo com SCHULZ *et al.* (1992) conceitualmente estas três teorias são distintas. Elas conduzem a equações cujos resultados matemáticos podem ser eventualmente comparados, sendo sugeridas relações entre as diferentes variáveis definidas em cada modelo. Contudo, a validade desses modelos deve ser ainda verificada experimentalmente.

Muitos modelos que visam compatibilizar as três teorias básicas mencionadas têm surgido na literatura, entre os quais os de DOBBINS (1964a), TOOR e MARCHELLO (1958), e SCHULZ *et al.* (1991, 1992). As suas aplicabilidades, entretanto, parecem momentaneamente restritas. Outrossim, parece haver uma preferência mais ou menos generalizada pela descrição dos fenômenos interfaciais através das teorias de penetração-renovação superficial (mostrado mais adiante). Associado a este fato, há ainda o problema de as teorias envolverem variáveis não facilmente mensuráveis.

### 3.9 DESENVOLVIMENTO DO FUNDAMENTO TEÓRICO DOS MODELOS DE TRANSFERÊNCIA NA INTERFACE AR-ÁGUA

O fluxo líquido de qualquer substância através da interface, ilustrado na figura 3.2, é descrito pela lei de Fick, repetida aqui por conveniência,

$$J = - D_i \left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=0} \quad (3.18)$$

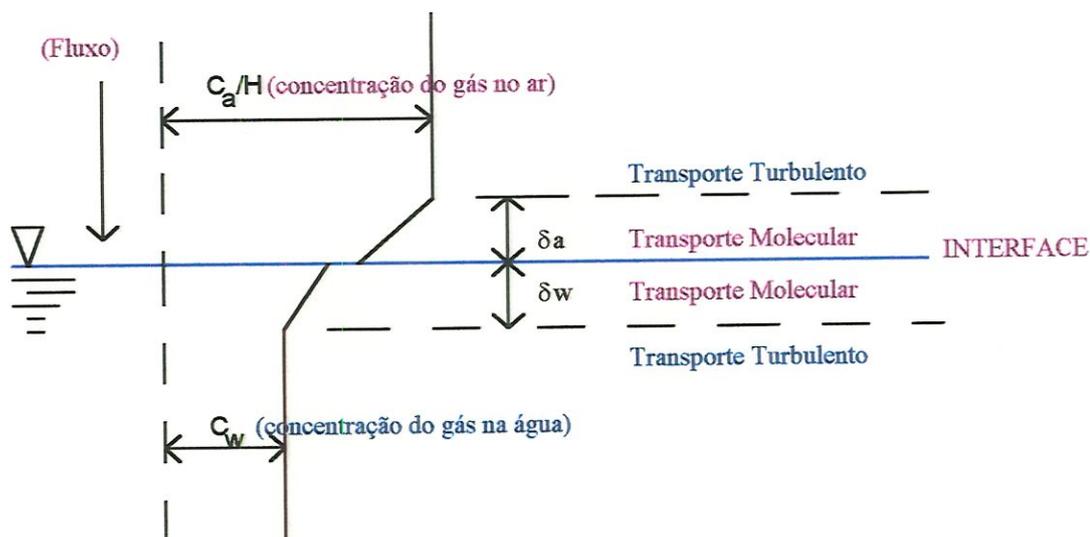
onde  $J$  é o fluxo líquido da substância por unidade de área,  $D_i$  é o coeficiente de difusão molecular da substância na água ou no ar,  $C$  é a concentração, e  $y$  é a distância da interface. O fluxo líquido na interface ar-água torna-se nulo (equilíbrio) quando a razão de concentração no ar e na água é igual à constante adimensional da lei de Henry,  $H_e$ ,

$$H_e = \frac{C_a}{C_w} \quad (3.19)$$

$C_a$  é a concentração no ar e  $C_w$  é a concentração na água. Se a concentração no ar for expressa como pressão parcial,  $H_e$  terá como unidades (pressão/concentração).  $H_e$  é função das propriedades do soluto, da temperatura, salinidade, etc, e é um parâmetro bem conhecido para os gases mais comuns como oxigênio, nitrogênio e dióxido de carbono. Porém seu comportamento ainda não é bem conhecido para substâncias mais complexas.

Em muitas aplicações, é opinião aceita que a região onde ocorre a transferência de massa por processo puramente difusivo é bastante pequena, especialmente quando o escoamento do fluido é turbulento (JIRKA, 1991). É conveniente expressar o fluxo líquido de um gás como o produto de um coeficiente de transferência do corpo líquido,  $K_i$ , e a diferença de concentração deste gás entre a fase líquida (água) e a atmosfera, como:

$$J = K_i \left( \frac{C_a}{H_e} - C_w \right) \quad (3.20)$$



**Figura 3.2:** Gradiente de concentração na interface ar-água como assumida pela teoria de dois filmes.

O inverso do coeficiente de transferência do corpo de água pode ser conceitualizado como uma resistência à transferência de massa, formada de resistências em série das fases líquida e gasosa (LEWIS e WHITMAN, 1924). A equação abaixo mostra que a resistência global à transferência na interface é a soma das resistências das fases envolvidas, respectivamente líquida e gasosa:

$$\frac{1}{K_i} = \frac{1}{K_L} + \frac{1}{H_e \cdot K_g} \quad (3.21)$$

$K_L$  é o coeficiente de filme líquido e  $K_g$  é o coeficiente de filme gasoso. Para substâncias químicas poucos solúveis,  $H_e \cdot K_g \gg K_L$  e  $K_i \cong K_L$ . Entretanto, existe um grande número de compostos, tais como os pesticidas e herbicidas mencionados anteriormente, que a maior resistência ao transporte está no filme gasoso, onde  $H_e \cdot K_g \ll K_L$ . Existem também alguns compostos tais como amônia, benzeno, bifenil, aldrin, naftaleno, DDT, e clorofórmio que são controlados por ambas as fases e requerem o uso da equação 3.21 completa para determinar a transferência de massa no corpo de água.

Seguindo uma cronologia mencionada por GULLIVER (1991), a primeira teoria para transferência de massa na interface líquido-sólido em escoamentos turbulentos

foi proposta por NERST (1904)<sup>6</sup>, *apud* GULLIVER (1991). Entretanto a primeira teoria mencionada para a interface líquido sólido foi a teoria dos filmes. Esta teoria estabelece que um filme estagnado, estacionário no tempo e não transportado, existe em cada um dos lados da interface. O gradiente de concentração seria uma reta em cada filme (figura 3.2), em equilíbrio através da interface. Então,

$$K_g = \frac{D_a}{\delta_a} \quad \text{ou} \quad Sh_a = \frac{K_g \delta_a}{D_a} = 1 \quad (3.22a)$$

$$K_L = \frac{D_w}{\delta_w} \quad \text{ou} \quad Sh_w = \frac{K_L \delta_w}{D_w} = 1 \quad (3.22b)$$

onde  $D_a$ ,  $D_w$  são as difusividades moleculares da substância em questão no ar e na água;  $\delta_a$  e  $\delta_w$  são as espessuras da camada estagnada (camada limite de concentração) no ar e na água, respectivamente; e  $Sh_a$  e  $Sh_w$  são os números de Sherwood para o ar e água, respectivamente, os quais são convenientemente definidos a partir do coeficiente de transporte  $K_i$  e das espessuras dos filmes.

A teoria dos filmes não é a melhor teoria conceitual de transferência de massa na interface ar-água em escoamentos turbulentos, porque a espessura do filme está em contínua mudança com o tempo e é convectado com a velocidade da superfície (GULLIVER, 1991). No entanto, a teoria é conveniente para calcular a espessura "efetiva"  $\delta_a$  e  $\delta_w$  a partir de medidas de transferência de massa e é às vezes usada com este propósito.

Já a teoria de renovação superficial (DANKWERTS, 1951) é uma expansão da teoria da penetração desenvolvida por HIGBIE (1935). Conceitua que o líquido na superfície é periodicamente renovado pelo próprio corpo líquido, ou seja, porções turbulentas de líquido são continuamente trocadas na superfície. Embora o processo difusivo molecular exista abaixo da interface, a espessura do filme no qual ele atua varia no tempo e no espaço. A teoria da renovação superficial estabelece essencialmente que a frequência de renovação é o fator mais importante na transferência de massa na interface ar-água, ou seja, bem mais do que a espessura dos filmes.

<sup>6</sup> Nerst, W. (1904) - Theory der reaktionsgeschwindigkeit in heterogenen systemen. Zeitschrift für Physikalische Chemie. Vol. 47. pp. 52-55. No caso, Nerst propôs o filme para contato direto entre a fase líquida e sólida. A partir daí surgiu uma teoria de transferência que permitiu entender o controle de uma reação química entre as referidas fases.

O fluxo difusivo não estacionário  $J(t)$  através da interface, de acordo com a teoria da penetração, é dada pela equação abaixo:

$$J(t) = \sqrt{\frac{D_i}{\pi \cdot t}} [C_{y=0} - C_{y=\infty}] \quad (3.23)$$

onde  $t$  é o tempo desde que o fluido foi renovado, ou a idade dessa porção renovada;  $C$  é a concentração, e  $y$  é a distância a partir da interface. O fluxo médio temporal e espacial é então

$$\bar{J} = \int_0^{\infty} P(t) \cdot J(t) dt \quad (3.24)$$

onde  $P(t)$  é a probabilidade do elemento superficial em questão ter a idade menor ou igual a  $t$ . Dankwerts obteve, para  $P(t)$ , a expressão

$$P(t) = r \cdot e^{-r \cdot t} \quad (3.25)$$

onde  $r$  é a taxa de renovação superficial média (HINES e MADDOX, 1985). A união das equações 3.24-25 conduziu ao resultado:

$$K_L = \sqrt{D_w \cdot r_w} \quad \text{e} \quad K_g = \sqrt{D_a \cdot r_a} \quad (3.26)$$

onde  $r_a$  e  $r_w$  são as taxas médias de renovação superficial nos lados do ar e da água, respectivamente.

A teoria de renovação superficial considera grandes e pequenos turbilhões como fontes de renovação ou difusividade turbulenta no mecanismo de renovação. Entretanto, apesar de as teorias de penetração-renovação estarem melhor conceituadas, elas incorporam novos parâmetros, os quais precisam ser verificados experimentalmente. Esses modelos foram revisados em BENNETT e RATHBUN (1972) e THEOFANOUS (1984).

KISHINEVSKY (1955) e KISHINEVSKY & SEREBRIANSKY (1955) abordaram o problema de transferência de massa a partir de uma nova interpretação da equação de transferência, visto que não se conhece a variação da difusividade efetiva,  $D_e$ , que atua no sistema, para com a distância normal à superfície,  $y$ .  $D_e$  é a soma das difusividades molecular ( $D_{AB}$ ) e turbulenta ( $D_t$ ) na interface, dada por

$$De = D_i + D_T. \quad (3.27)$$

O modelo proposto pelos referidos autores é dado pela equação abaixo:

$$K_L = \sqrt{\frac{4 \cdot D_e}{\pi \cdot \Delta \tau}} \quad (3.28)$$

onde  $De$  é o coeficiente efetivo de difusão (oriunda da equação 3.29),  $\Delta \tau$  é o período de renovação ou tempo de contato das fases.

O principal argumento dos autores é que para altas agitações,  $D_T \gg D_i$ , o que conduz a uma independência do coeficiente de transferência para com a difusividade molecular. Segundo SCHULZ *et al.* (1992), pode-se argumentar que, uma vez que  $D_T$  é o único parâmetro que quantifica a agitação, podendo ser variado livremente de acordo com o experimento desenvolvido e sendo  $D_i$  um valor constante (geralmente pequeno, ver tabela 3.2), espera-se uma tendência assintótica na qual  $D_T$  governa o fenômeno em altas agitações. Essa indicação sugere que para altas agitações o processo é principalmente controlado pela difusão turbulenta (segunda parcela da equação 3.27), tendo a difusão molecular uma participação reduzida na troca. Isto vai de encontro às teorias de penetração-renovação superficial e teoria dos filmes, visto que sempre o coeficiente de transferência de massa é função da difusividade molecular elevado a um expoente próximo de 1 para a teoria dos filmes e próximo de 0.5 para a teoria da renovação-penetração.

KING(1966), citado pelos autores KOZINSKI e KING (1966), SCHULZ (1985) e BARBOSA (1997), apresentou um modelo pelo qual as teorias da renovação superficial e da penetração do filme são casos especiais e uma formulação mais geral (teoria da renovação superficial com difusividade amortecida). Este modelo incorpora uma difusividade turbulenta na equação da difusão para levar em conta o papel da turbulência numa fina camada próxima à superfície, na forma seguinte:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ (D_i + D_t) \frac{\partial C}{\partial y} \right] \quad (3.29)$$

onde a difusividade turbulenta é escrita em termos da distância à superfície na forma  $D_t = a \cdot y^b$  a fim de levar em consideração o amortecimento devido à presença de

uma interface. Seguindo este raciocínio, SCHULZ e SCHULZ (1991,1992) e SCHULZ *et al.* (1993), apresentaram uma proposta de solução da equação 3.27, que permitiu englobar as tendências já mencionadas, desde as teorias dos dois filmes, as teorias da penetração-renovação, até a tendência esperada para as altas agitações. Para detalhes sobre o modelo, ver CUNHA (1994) e MOMESSO (1996). SCHULZ e SCHULZ (1991), resolveram a equação (3.29) assumindo que  $b = 1$  para o expoente de  $D_i$ , e  $a$  representando uma escala de velocidade, sendo que alguns parâmetros adimensionais foram definidos. Aqui apenas serão apresentadas as formas de variação simplificadas e os parâmetros envolvidos no processo de transferência, representada pela equação:

$$m^* \propto (x_{min})^n \quad (3.30)$$

onde  $m^* = (a \cdot h)/D_i$ ,  $D_i$  é a difusividade molecular do gás em questão e,  $a$  é uma velocidade característica do sistema,  $h$  é a profundidade da lâmina d'água (especificamente a razão entre o volume do corpo da água e a sua "área de troca");  $x^*_{min}$  é a definição da posição da interface segundo um sistema de referência apropriado, igual a  $(K_i \cdot D_i/a^2)$ , e  $K_i$  é o coeficiente de transferência de massa<sup>7</sup>. Daí segue a relação

$$K_i \propto a^\beta [D_i/h]^{1-\beta}, \quad \text{onde } \beta = \frac{2n+1}{n} \quad (3.31)$$

Com estes dados, pode-se montar a tabela 3.2, abaixo, a qual mostra que as tendências anteriormente mencionadas nas teorias dos dois filmes, penetração-renovação e altas agitações são englobadas no modelo, cada um sendo um caso particular deste.

**Tabela 3.2:** Valores de  $\beta$  e relações entre  $K_i$ ,  $a$ ,  $h$  e  $D_i$  para vários valores de  $n$ .  
Fonte: SCHULZ (1992).

Condição	$n$	$\beta$	$K_L$
$m^*$ baixo	$-1/2$	0	$w_1 \cdot a^0 \cdot [D_i/h] \longrightarrow w_1 \cdot D_i/h$
$m^*$ médio	$-2/3$	$1/2$	$w_2 \cdot a^{1/2} \cdot [D_i/h]^{1/2} \longrightarrow w_2 \cdot \sqrt{D_i \cdot s}$
$m^*$ alto	-1	1	$w_3 \cdot a^1 \cdot [D_i/h]^0 \longrightarrow w_3 \cdot a$

onde  $w_1$ ,  $w_2$ ,  $w_3$  são constantes e  $s = a/h$ .

<sup>7</sup> No programa TANK.FOR, constam duas subrotinas, XMASTER E MASTER, que calculam os valores  $x^*_{min}$  e  $m^*$ , para todos os valores experimentais de cada experimento, por autor estudado.

Resultados de diferentes fontes corroboram as aproximações sugeridas por esta formulação (SCHULZ *et al.* 1993, CUNHA, 1993, e CUNHA *et al.*, 1994).

Para calcular  $m^*$  e  $x_{min}^*$  necessita-se dos parâmetros hidráulicos: profundidade média,  $h$ (m), uma velocidade característica do escoamento,  $a$ (m/s); e parâmetros físico-químicos de transferência de massa: coeficiente de difusão molecular,  $D_i$  (m<sup>2</sup>/s), coeficiente de transferência de massa,  $K_i$  (s<sup>-1</sup>). A escala de velocidade adotada para o equipamento simulado neste trabalho é a velocidade tangencial no extremo do impulsor, ou seja,  $a = \pi L \cdot \omega$ , onde  $\omega$  é a velocidade angular,  $L$  é o comprimento do diâmetro (ou raio  $R$ ).

Em BENNET e RATHBUN (1972) são descritos, detalhadamente, os tratamentos sobre transferência de massa que têm conseguido sucesso apenas sob condições restritas de análise. Os autores descrevem que na literatura da área há três grupos gerais de modelos: **(1) modelos conceituais**, baseados em hipóteses formuladas para o processo de transferência: Modelo dos Dois Filmes, LEWIS e WHITMAN (1924); Modelo de Penetração, HIGBIE (1935); Modelo da Renovação Superficial, DANKWERTS (1951); Modelo de Alta Agitação, KISHINEVSKY, KISHINEVSKY E SEREBRIANSKY (1955); Modelo da Penetração do Filme, DOBBINS (1956); Modelo de Mistura Localizada, TOOR e MARCHELO (1963); Modelo da Difusividade Turbulenta de Renovação Superficial Amortecida, KING (1966); Modelo dos Grandes Turbilhões, FORTSCUE e PEARSON (1967), THEOFANOUS (1984), Modelo da Aproximação Linear da Difusividade Turbulenta de SCHULZ e SCHULZ (1991, 1992). A partir de um estudo dessa literatura, é possível sugerir que não se pode esperar que uma única equação forneça em definitivo o coeficiente de transferência, representado por  $K_i$ , sendo que características físicas, geométricas e cinemáticas do escoamento interferem na sua quantificação. **(2) semi-empíricos**, que combinam convenientemente os fatores que afetam o processo de transferência de massa na superfície livre. Neste caso, as constantes nas relações, assim sugeridas, são determinadas por regressões múltiplas: KRENKEL e ORLOB (1963); THACKSTON (1969a). E **(3) modelos empíricos**, resultantes de análises de regressão múltipla das variáveis consideradas relevantes ao investigador, ou a partir da análise dimensional utilizando parâmetros do escoamento médio, do gás e do líquido: STREETER e PHELPS (1925); CHURCHIL *et al.* (1962); LANGBEIN e DARUM (1966); ISAACS e GAUDY (1968); e NEGULESCU e ROJANSKY (1969). Em BARBOSA (1997). As referências mencionadas apresentam estes modelos bem detalhados.

Considerando-se os trabalhos teóricos de SCHULZ e SCHULZ (1991, 1992) SCHULZ *et al.* (1993) e os trabalhos experimentais de CUNHA (1993) e MOMESSO (1996), vê-se que a representação física do problema interfacial de transferência de massa deve envolver modelos convenientes que relacionem as variáveis definidas ao longo dos desenvolvimentos teóricos, mas as descrições assim obtidas podem ser comprovadas apenas mediante resultados experimentais.

### 3.10 MÉTODOS DE OBTENÇÃO DO COEFICIENTE DE REAERAÇÃO $K_2$

A inexistência de uma teoria única de aceitação geral nas três últimas décadas conduziu ao desenvolvimento de métodos experimentais de determinação do coeficiente de reaeração,  $K_2 = K_i / h$ , onde  $h$  é a profundidade média do corpo de água em questão. As técnicas empregadas são baseadas em métodos indiretos, como a técnica do balanço de oxigênio, STREETER e PHELPS (1925) e a técnica de perturbação do equilíbrio, GAMESON e TRUESDALE (1955), e CHURCHIL *et al.* (1962). Ao longo deste período, TSIVOGLU *et al.* (1965, 1968, 1979) desenvolveram o método conhecido como a *técnica dos traçadores gasosos*. Este é o método mais difundido e aceito atualmente (FRIEDMANN *et al.* 1991 e BARBOSA e GIORGETTI, 1995). Porém, o mesmo era utilizado, originalmente, com traçadores radioativos. A técnica foi modificada pela substituição do traçador radioativo por um traçador gasoso orgânico, especificamente hidrocarbonetos leves como: propano, etileno, etc. A fundamentação da técnica reside na *constância da razão entre os coeficientes de troca de gases distintos*, submetidos às mesmas condições físicas, como idênticas condições de turbulência e de temperatura. Geralmente, esta razão é obtida experimentalmente *em tanques de mistura*, dentro de uma faixa limitada de condições, como as supra citadas. Uma das grandes vantagens do emprego da técnica é a possibilidade de calibração de modelos empíricos e semi-empíricos, os quais relacionam o coeficiente de reaeração com parâmetros físicos, por assim dizer, facilmente mensuráveis no escoamento (PARKER e GAY, 1987).

A razão mencionada, denominada fator de conversão ou razão de transformação ( $R_{ij} = K_i/K_j$ ) é um parâmetro relativamente fácil de ser determinado em laboratório. Este fator é utilizado para a determinação de coeficientes de aeração atmosférica,  $K_2$ , em corpos d'água e também pode ser introduzido nos modelos de qualidade de água com o objetivo de gerenciar e controlar os níveis de oxigênio e garantir os níveis mínimos de sustentação da vida (seres aquáticos superiores como, por exemplo, peixes, etc).

McCUTCHEON *et al.* (1989) apresentam uma abordagem detalhada sobre traçadores em água objetivando sua aplicação em modelos de qualidade da água. RATHBUN *et al.* (1978), McCUTCHEON *et al.* (1989) descrevem que, desde o uso original do propano e etileno como traçadores gasosos, pelo menos no caso do etileno, poderia haver um certo grau de biodegradabilidade em alguns tipos de correntes, o que justificaria o abandono deste gás ao longo dos últimos anos. Isto aponta uma primeira desvantagem do uso de hidrocarbonetos como traçadores. Uma outra desvantagem da técnica é que os traçadores hidrocarbonetos são pouco solúveis em água, requerendo uma injeção contínua de borbulhamento de gás a fim de alcançar níveis mínimos de concentração para detecção em um ponto a jusante em correntes naturais. McCUTCHEON *et al.* (1989) dizem que basicamente o método dos hidrocarbonetos requer métodos e equipamentos mais elaborados do que as outras técnicas, porém ele não apresenta os problemas de saúde pública como o uso de traçadores radioativos.

A tabela 3.3 mostra as razões entre coeficientes de reaeração e coeficientes de volatilização encontradas na literatura para diversas situações experimentais.

Apesar da proposta de constância nos trabalhos de WILCOCK (1984a,b), houve uma significativa variação com relação à razão  $R_{ij} = K_i/K_j$ , para o traçador cloreto de metila, onde  $K_2/K_{CH_3Cl}$  variou com a temperatura (dentro de uma faixa de 5 a 35 °C). O resultado foi a equação abaixo:

$$\frac{K_{CH_3Cl}}{K_2} = 4.323 \cdot \exp\left(\frac{-530.97}{T(Kelvin)}\right) \quad (3.32)$$

Finalmente, com relação a traçadores alternativos, HOVIS *et al.* (1984) desenvolveram preliminarmente um método para quantificar kriptônio não radioativo para estudos de aeração em estações de tratamento de águas residuárias. Se for possível medir baixas concentrações de kriptônio estável, o uso desta técnica poderá superar algumas das dificuldades envolvidas na aplicação das técnicas de traçadores radioativos ou traçadores hidrocarbonetos. Entretanto, McCUTCHEON *et al.* (1989) sugere que a primeira dificuldade seria o acesso para operar equipamentos apropriados, como o espectrômetro de massa.

**Tabela 3.3:** Razões entre Coeficientes de Reaeração e Coeficientes de Volatilização de Vários Compostos encontrados na Literatura.

COMPOSTO	RAZÃO	REFERÊNCIA	COMENTÁRIOS
ETILENO	$1.15 \pm 0.02$	Rathbun <i>et al.</i> (1978)	Determinação Experimental. Não encontrou nenhum efeito sobre filmes de óleo ou surfactantes.
PROPANO	$1.39 \pm 0.03$	Rathbun <i>et al.</i> (1978)	Determinado em canal de laboratório.
ETILENO	$1.13 \pm 0.11$	Bales e Holley (1986)	Determinado em tanque de mistura.
PROPANO	$1.36 \pm 0.13$	Bales e Holley (1986)	Canais de Laboratório.
ETILENO	$1.14 \pm 0.09$	Rainwater e Holley (1983,1984)	Estudos de Laboratório. Tanques de mistura.
PROPANO	$1.36 \pm 0.09$	Rainwater e Holley (1983,1984)	Estudos de Laboratório. Tanques de mistura.
CLORETO DE METILA	1.41	Wilcok (1984a,b)	A 20 °C – Laboratório. Rios.
KRIPTÔNIO	$1.20 \pm 0.07$	Tsivoglou e Wallace (1972)	Reaeração em correntes naturais.
1,1,1-TRI-CLOROETANO	$1.68 \pm 0.08$	Rathbun e Tay (1982)	Volatilização em correntes naturais
1,2-DI-DICLOROETANO	$1.61 \pm 0.04$	Rathbun e Tay (1982)	Volatilização em correntes naturais
DIÓXIDO DE CARBONO	$1.04 \pm 0.02$	Ljubisavljevic (1984)	Planta de tratamento de águas residuárias.
BENZENO, CLOROFÓRMIO, CLORETO DE METILENO E TOLUENO	1.53	Rathbun e Tay (1982)	Correntes naturais.
CLORETO DE VINILA	$0.43 \pm 0.07$	Hill <i>et al.</i> (1976)	Ecossistemas Aquáticos.
ETILENO	$1.138 \pm 0.146$	Barbosa (1989)	Tanques de Mistura
METANO* <sup>(8)</sup>	$1.216 \pm .012$	Momesso (1996)	Tanques de Mistura (CUNHA, 1993)
PROPANO*	$1.431 \pm 0.019$	Momesso (1996)	Tanques de Mistura (CUNHA, 1993)
ACETILENO*	$1.126 \pm 0.015$	Momesso (1996)	Tanques de Mistura (CUNHA, 1993)

Além da técnica dos traçadores gasosos outras estão emergindo com o mesmo intuito de quantificar o coeficiente de reaeração, como os trabalhos de CARREIRA (1995) e ROMA (1995), sobre a relação entre o coeficiente de reaeração e parâmetros de turbulência superficial obtidos por métodos ópticos. Além desse, o método de

<sup>8</sup> Parâmetros experimentais que foram utilizados neste trabalho.

traçador sólido, proposto inicialmente por GIORGETTI e GIANANTI (1983), seguidos posteriormente por SCHULZ (1985), BICUDO (1988), BICUDO e JAMES (1990), SCHULZ (1990), GIORGETTI e SCHULZ (1990), SCHULZ e GIORGETTI (1991) e COSTA (1997)<sup>9</sup>. Esse método se baseia no fato de que, tanto o processo de absorção do oxigênio quanto a solubilização da sonda solúvel, dependem das características turbulentas do meio, devendo haver uma relação entre elas. Esses estudos mostram também a versatilidade (modos de abordagens) do assunto e as técnicas que surgem em função do avanço do conhecimento acerca do tema, o qual se mostra intrinsecamente interdisciplinar.

Observa-se na literatura a inexistência de uma abordagem e uma quantificação definitiva para os coeficientes de transferência de massa. Há, no entanto, a busca da unificação das tendências dos modelos conceituais apresentados, vislumbrando um melhor entendimento sobre o assunto. Os parâmetros hidrodinâmicos e físico-químicos influenciam determinantemente o processo de transferência interfacial e, portanto, os experimentos são muito vulneráveis às variações de condicionamento experimental, tanto de laboratório quanto em campo. Novas abordagens e estudos para o assunto são, portanto, necessárias.

### 3.11 A INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA NO COEFICIENTE DE TROCA $K_l$

Na literatura da área diversos estudos são apresentados sobre o efeito da temperatura na transferência de gases na interface gás-líquido. A maioria desses é realizado para determinar o valor do coeficiente  $\theta$  (não confundir com o componente angular da equação de transporte) da equação

$$K(T) = K(20^\circ\text{C}) \theta^{(T-20)} \quad (3.33)$$

onde  $K(T)$  é a taxa de transferência de massa (geralmente absorção de oxigênio) em uma temperatura qualquer e  $K(20^\circ\text{C})$  é a taxa de transferência de massa a  $20^\circ\text{C}$ .

No entanto, existem certas discrepâncias com relação ao valor de  $\theta$ , na quantificação do coeficiente de transferência de massa. De fato, não é definitivamente aceito que a equação 3.33 represente o efeito da temperatura sobre

<sup>9</sup> Comunicação pessoal. Tese em andamento: "Desenvolvimento de metodologia de campo para determinação indireta do coeficiente de reaeração dos escoamentos naturais da água com emprego do método da sonda solúvel".

$K_2$  (ver CHAO 1987a,b). Os valores observados em vários estudos de campo e de laboratório parecem estar limitados à faixa  $1,008 \leq \theta \leq 1,047$ , apresentados pelos autores TRUESDALE e Van DIKE (1958), e STREETER *et al.* (1926), *apud* RAINWATER e HOLLEY (1983). ELMORE e WEST (1961), estudando a absorção do oxigênio, obtiveram o valor de 1,0241 para  $\theta$  em um tanque no qual a agitação não "quebrou" a superfície da água. Este valor tem-se tornado comum e tem sido utilizado na previsão de  $K_2$  (para o oxigênio), pois parece representar um valor "médio" entre os extremos mencionados. Portanto, a generalidade aceita acerca do valor de  $\theta = 1,0241$  da correção de temperatura parece ter sua origem em 1961, o qual foi determinado pela ASCE (1961) - *American Society of Civil Engineers Committee on Sanitary Engineering Research*. JENSEN (1991), fez um estudo do efeito de temperatura para baixos níveis de agitação, avaliando diferentes efeitos da temperatura sobre a absorção de gases e obtendo valores de  $\theta = 1,035$  para dois gases. Verificou ainda que  $\theta$  não variou de modo diferente para altos e baixos níveis de turbulência.

No trabalho de CUNHA (1993) a tendência obtida não seguiu aquela mencionada por RAINWATER e HOLLEY (1983). Na tabela 3.4 são mostrados resultados experimentais dos testes nas temperaturas 15, 20, 25 e 30°C, para os gases metano, etileno e acetileno. Como já foi dito, o valor de  $\theta$  sugerido pela ASCE (1961) nas normas de medida de coeficientes de reoxigenação é 1,0241. Em CUNHA (1993) os valores médios obtidos diferiram em média 1,21% do "valor normalizado". Os maiores erros foram relacionados aos testes com maiores agitações. O efeito da temperatura, quando analisado de acordo com a relação da equação 3.6 produziu valores médios de  $\theta$  de 1,0366 para gás metano, 1,0262 para o acetileno e 1,0307 para o etileno, na faixa de temperatura de 15 e 25°C, como mostrado na tabela 3.4. Estes valores apresentam desvios do valor padrão ( $\theta = 1,0241$ ), porém ainda mantendo uma boa proximidade para com o mesmo.

Segundo McCUTCHEON *et al.* (1989) nas aplicações das equações de reaeração, as correções de temperatura são necessárias se as mudanças são significantes (de 1 a 2°C) e são necessárias quando se deseja fazer comparações entre equações e resultados. Na tabela 3.5 são mostrados resultados de alguns estudos efetuados para estimar o parâmetro de correção de temperatura  $\theta$ .

É importante lembrar que a equação 3.33 é aplicada às equações empíricas e semi-empíricas de  $K_2$ . Entretanto, para equações baseadas em modelos conceituais

estas correções não são aplicadas tão diretamente (O'CONNOR e DOBBINS, 1958<sup>10</sup> *apud* McCUTCHEON *et al.*, 1989). A diferença básica está na substituição do coeficiente de transferência de massa (equação 3.33) pela difusividade molecular, sendo que  $\theta$  apresenta, para a difusividade molecular, o  $\theta = 1,037$ , como indicado na equação abaixo:

$$D_i = D_{i(20^\circ C)} (1.037)^{(T-20)} \quad (3.34)$$

onde  $D_i(20^\circ C)$  é dado em  $\text{cm}^2/\text{s}$ . McCUTCHEON *et al.* (1989), indicam que outras formas são apresentadas na literatura e, em qualquer caso, as outras equações produzem resultados diferentes da equação 3.34 quando correções de temperatura são estimadas.

---

<sup>10</sup> O'CONNOR, D. J. e DOBBINS, W. E. (1958) - Mechanism of reaeration in natural streams. *Trans. Am. Soc. Civ. Eng.* 2934, 641.

**Tabela 3.4:** Valores de  $\theta$  (mínimos, máximos e médios) nas faixas de temperatura de 15 a 25°C, 20 a 30°C e 15 a 30°C. Fonte: CUNHA (1993).

15 a 25°C	METANO	ACETILENO	ETILENO
24 Experimentos	(I)	(II)	(III)
$\theta$ (mínimo)	1,000	1,0075	1,0052
$\theta$ (máximo)	1,042	1,0409	1,0431
$\theta$ (médio)	1,036	1,0262	1,0307
20 a 30°C	METANO	ACETILENO	ETILENO
6 Experimentos	(IV)	(V)	(VI)
$\theta$ (mínimo)	1,0284	1,0287	1,0299
$\theta$ (máximo)	1,0465	1,0294	1,0436
$\theta$ (médio)	1,0366	1,0291	1,0355
15 a 30°C	METANO	ACETILENO	ETILENO
6 Experimentos	(VII)	(VIII)	(IX)
$\theta$ (mínimo)	1,0420	1,0317	1,0380
$\theta$ (máximo)	1,0572	1,0488	1,0628
$\theta$ (médio)	1,0496	1,0403	1,0504

#### CÁLCULO DOS ERROS COMPARADOS COM " $\theta$ " NORMALIZADO

$\theta(\text{normalizado}) = 1,0241$ (para o oxigênio)		
$\text{Erro} = \left  \frac{\theta_{\text{calculado}} - \theta_{\text{normalizado}}}{\theta_{\text{normalizado}}} \right  \cdot 100\% \longrightarrow \text{Erro Relativo}^{11}$		
E(I) = 0,59%,	E(IV) = 1,22%,	E(VII) = 2,49%,
E(II) = 0,21%,	E(V) = 0,49%,	E(VIII) = 1,58%,
E(III) = 0,60%,	E(VI) = 1,11%,	E(IX) = 2,57%.

<sup>11</sup> E representa o Erro Relativo.

**Tabela 3.5:** Valores de  $\theta$  Reportados na Literatura para o Coeficiente de Reaeração  $K_2$ . Adaptada da Fonte: McCUTCHEON *et al.*(1989).

REFERÊNCIAS	COEFICIENTE DE CORREÇÃO $\theta$	COMENTÁRIOS
Streeter (1926)	1.0159	Proposta como estimativa preliminar usando dados de correntes e posteriormente revisado.
Streeter <i>et al.</i> (1936)	1.047*	Estimativa baseada sobre dados questionáveis em canal pela falta de controle de temperatura.
Downing e Truesdale (1955) <i>apud</i> McCUTCHEON (1989)	1.022±0.005	Baseado em experimentos com tanques de mistura (em becker). A dependência sobre a taxa de mistura foi observada. Em 12.8 rpm $\theta = 1.0202$ ; em 38 rpm $\theta = 1.0238$ ; em 86.8 rpm $\theta = 1.0173$ ; em 115 rpm $\theta = 1.0206$ . Essas investigações indicaram que uma equação linear representa melhor o efeito de mudanças de T sobre $K_2$ .
Truesdale e Vandike (1958)	1.018, 1.015, 1.008* e 1.018	Determinada em experimentos em canais. Também foi sugerido que uma expressão linear se ajustava melhor aos seus dados.
ASCE (1961)	1.0241	Determinado por testes de mistura em frascos dotados de grandes e pequenos impulsores à 5, 10, 15, 20, 25 e 30 °C, usando réplicas experimentais e água destilada. O valor de $\theta = 1.0226$ quando se utilizou impulsores maiores formando vortex. Nos impulsores menores isso não ocorreu. Os dados seguem a fórmula de Arrhenius.
Metzger (1967-8)	1.013 (10-0°C), 1.016 (20-30°C),	Valores relacionados com graus de mistura. Valores parecem estar de acordo com aqueles obtidos a partir da difusão molecular, espessura do filme e taxa de mistura. Os dados seguem a fórmula de Arrhenius.
Tsivoglou e Wallace (1972) <i>apud</i> McCUTCHEON (1989)	1.022±0.004	Determinado por Tsivoglou usando Métodos Padrão de dados de saturação. O cloreto não apresentou nenhum efeito.
Krenkel e Novotny (1980) <i>apud</i> McCUTCHEON (1989).	1.029	Valor recomendado de origem desconhecida.

(\*) 1.008 e 1.047 é a faixa de variação de  $\theta$  na literatura.

### 3.12 TAXA DE DISSIPACÃO DE ENERGIA CINÉTICA - $\varepsilon$

De acordo com SCHULZ (1985, 1989) a busca de parâmetros convenientes que possam ser relacionados com os coeficientes de transferência de massa, conduziu a um estudo mais detalhado por parte dos pesquisadores da área, do fenômeno turbulento em si e de seus parâmetros relevantes. Neste sentido SCHULZ *et al.* (1990) apresentam modelos para reoxigenação de corpos de água baseados nas teorias de misturadores isotrópicos, os quais relacionam o campo turbulento de concentrações com o campo turbulento de velocidades. Nesse caso, a taxa de dissipação de energia,  $\varepsilon$ , surge como parâmetro hidrodinâmico fundamental na quantificação do coeficiente de reoxigenação (ou dessorção, ou volatilização de gases). No referido estudo foram sugeridos três comportamentos de  $K_L$  com  $\varepsilon$ , dados na forma

$$\begin{aligned} K_L &\propto \varepsilon^0 && \{\text{para baixas agitações}\} \\ K_L &\propto \varepsilon^{1/2} && \\ &&& \{\text{para agitações altas e moderadas}\} \\ K_L &\propto \varepsilon^{1/3} && \end{aligned} \quad (3.35)$$

No trabalho de CUNHA (1993) com relação à taxa de dissipação de energia,  $\varepsilon$ , os coeficientes de transferência de massa indicaram uma região com o expoente próximo de 1/3, que está em acordo com aproximações prévias baseadas na teoria de mistura isotrópica. Este comportamento foi observado quando a superfície da água manteve-se geometricamente plana. As possíveis causas de desvios em diferentes situações estão associadas às condições de deformação da superfície, com geração de ondas, bolhas e *sprays*. Isto ocorreu notadamente em altas agitações, onde a lei de potência com valor de 1/3 não foi confirmada. Também ocorreu desvio da lei de potência para níveis de agitação muito baixos, em que a turbulência não é prevacente na superfície e o modelo não é aplicável. Entretanto, os resultados mostraram uma boa concordância entre teoria e dados experimentais para uma ampla faixa de condições de agitação (CUNHA, 1993). Entre os limites acima mencionados os resultados dos testes de mistura sugerem, porém, estudos para baixas agitações, onde estão presentes os processos essencialmente difusivos. Ao se efetuar uma análise de  $K_L$  com  $\varepsilon$  nos trabalhos de outros autores como ROBERTS e DÄNDINKLER (1983), ROBERTS (1984), BARBOSA (1989), HSIEH *et al.* (1993), LJUBISAVLIEVIC (1984), e outros, verificam-se tendências do expoente de  $\varepsilon$  com  $K_L$  que indicam pelo menos duas fases distintas de comportamento, em conformidade com o sugerido pelas proporcionalidades aqui reunidas em equação 3.35. Algumas referências em que

podemos encontrar temas que tratam de problemas específicos da distribuição de energia no interior de tanques de mistura (tanto experimentais quanto numéricos, os quais podem ou não estar relacionados com transferência de massa em tanques de mistura) são, por exemplo: BATES *et al.* (1963), MANNING *et al.* (1963), CUTTER (1966), DESOUSA *et al.* (1972), RIAT *et al.* (1975), GÜNKEL *et al.* (1975), RIAT *et al.* (1976), TATERSON *et al.* (1980), JOSHI *et al.* (1982), HARVEY e GREAVES (1982a,b), DAVEIS *et al.* (1984), MIDLETON *et al.* (1986), MANN (1986), LAUFHÜTTE *et al.* (1987), WINARD *et al.* (1988), STENBERG *et al.* (1988a,b), RANADE e JOSHI (1989a,b), RANADE *et al.* (1989a,b), ABRARDI *et al.* (1990), KUNCEWICZ (1992), KRESTA *et al.* (1991), RANADE *et al.* (1992), KRESTA *et al.* (1993), CHAPLE e KRESTA (1994), IBRAHIM *et al.* (1995), ROBERTS *et al.* (1995). Vale lembrar que esta distribuição de energia é relevante para a simulação do corpo de água em agitação turbulenta. Particularmente, para o presente problema, interessa a distribuição de energia e sua dissipação junto à superfície. Um estudo interessante neste sentido foi feito por EIGER (1990), sobre escoamento em canais, onde foi apresentada uma abordagem sobre o parâmetro de dissipação de energia  $\varepsilon$  na superfície, em que a energia cinética é amortecida em direção à superfície.

BARBOSA (1997) constatou em seu trabalho com traçadores em rios, juntamente com as recentes investigações através de medidas diretas, que estas ainda fornecem informações limitadas do mecanismo de transferência, o que seria decorrente da dificuldade de se fazer observações na região de diminutas dimensões, como as da camada limite, principalmente em condições de intensas agitações. Por outro lado o mesmo autor descreve em suas conclusões que os melhores modelos de previsão do coeficiente de reaeração em corpos de água naturais foram aqueles que utilizam as velocidades e as profundidades médias, como parâmetros indicadores, respectivamente das escalas de velocidade e comprimento da turbulência, juntamente com a declividade da linha d'água, como indicador da dissipação de energia. No presente trabalho esses parâmetros são utilizados na simulação numérica do escoamento, fazendo-se relações entre estes e os respectivos coeficientes de troca.

### 3.13 VARIAÇÃO TEMPORAL DA CONCENTRAÇÃO EM UM CORPO LÍQUIDO

A equação de transferência de massa para o caso turbulento permite descrever a evolução do campo de concentrações médias em um corpo líquido. Quando não se consideram sumidouros ou fontes que não sejam a atmosfera, o balanço diferencial de massa utilizando a lei de Fick, já incorporando as flutuações de concentração,

utilizando as condições de Reynolds e a hipótese de Boussinesq, para o caso unidimensional, resulta em:

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = E_i \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y_i^2} \quad (3.36)$$

onde  $\bar{C}$  é concentração média temporal,  $E_i$  é um coeficiente de difusão turbulento (efetivo) médio espacial e  $y_i$  é a distância vertical. A equação 3.36 mostra a semelhança existente entre o equacionamento para a difusão molecular e a difusão turbulenta.

O modelo da equação 3.36 pode ser simplificado considerando a equação 3.37 que pode ser utilizada para descrever o fluxo de massa por unidade de área proporcional ao *déficit* relativo à saturação do gás no líquido:

$$F = \frac{1}{A} \frac{dm}{dt} = K_i (C_s - C_b) \quad (3.37)$$

onde  $A$  = área da interface gás-líquido,  $m$  = massa de gás dissolvido,  $F$  = fluxo de massa por unidade de área,  $t$  = tempo do processo,  $K_i$  = coeficiente de transferência de massa,  $C_s$  = concentração na superfície do líquido e  $C_b$  = concentração do gás dissolvido no volume do líquido,  $V_L$ . Observa-se, no entanto, que nos processos interfaciais a relação  $A/V_L$  é igualada à altura média da coluna de água,  $h=A/V_L$ , resultando em

$$\frac{\partial C_b}{\partial t} = K_i \frac{A}{V_L} (C_s - C_b) = K_i \cdot H \cdot (C_s - C_b) = K_L (C_s - C_b) \quad (3.38)$$

onde  $K_i$  é conhecido como coeficiente de transferência. Quando  $K_i = K_2$ , o mesmo é denominado de coeficiente de reaeração, conforme já comentado ao longo deste texto.

A integração da equação 3.38 resulta em uma função exponencial para o processo de transferência interfacial. Assim, a partir da evolução temporal da concentração do gases (variação exponencial expressa pelas equações de transferência) obtém-se, por regressão linear, os coeficientes de transferência de

massa interfacial. A análise é feita geralmente sobre o logaritmo da equação original, ou seja:

$$\frac{C_b - C_s}{C_0 - C_s} = \exp(-K_i t)$$

$$\log_e \left( \frac{C_b - C_s}{C_0 - C_s} \right) = -K_i t \quad (3.39)$$

A forma geral da equação 3.39 representa o processo de absorção ou dessorção. No caso da dessorção, a diferença básica está no fato de que  $C_s$  é admitido ser zero.

Para concluir esta parte da revisão lembramos novamente que  $K_2$  e  $K_i$  dependem tanto das variáveis físicas do meio (grandezas físico-químicas do solvente e do soluto) quanto das características do escoamento. Um único modelo parece não descrever, ainda, todos os aspectos relevantes em processos de transferência nas interfaces gás-líquido.

Apesar da forma simples da equação final, as relações envolvendo  $x^*_{min}$  (posição adimensional da interface) e  $m^*$  (é um adimensional que indica o nível de turbulência) e a taxa de dissipação de energia cinética (densidade de potência),  $\epsilon$ , puderam ser comprovadas experimentalmente e são promissoras para estudos numéricos envolvendo transferência interfacial de massa.

### 3.14 REATORES GÁS-LÍQUIDO AGITADOS MECANICAMENTE: ABSORÇÃO E DESSORÇÃO DE GASES

O presente item, bem como os itens 3.15 e 3.16, foram elaborados no sentido de fornecer uma visão geral da bibliografia relacionada ao assunto de agitadores mecânicos e de absorção e dessorção de gases. Esse tema é evidenciado a partir das proposições de GIBBON (1974), que anunciou a chegada da “Era Ambiental” em que o aumento da capacidade dos sistemas deu nova ênfase no tratamento de águas residuárias e aos custos de controle de poluição, com novas tecnologias sendo absorvidas pelo mercado, como a aeração superficial e a aeração por oxigênio puro. Assim, o custo energético tem assumido uma nova importância nas considerações de estações de tratamento de águas residuárias.

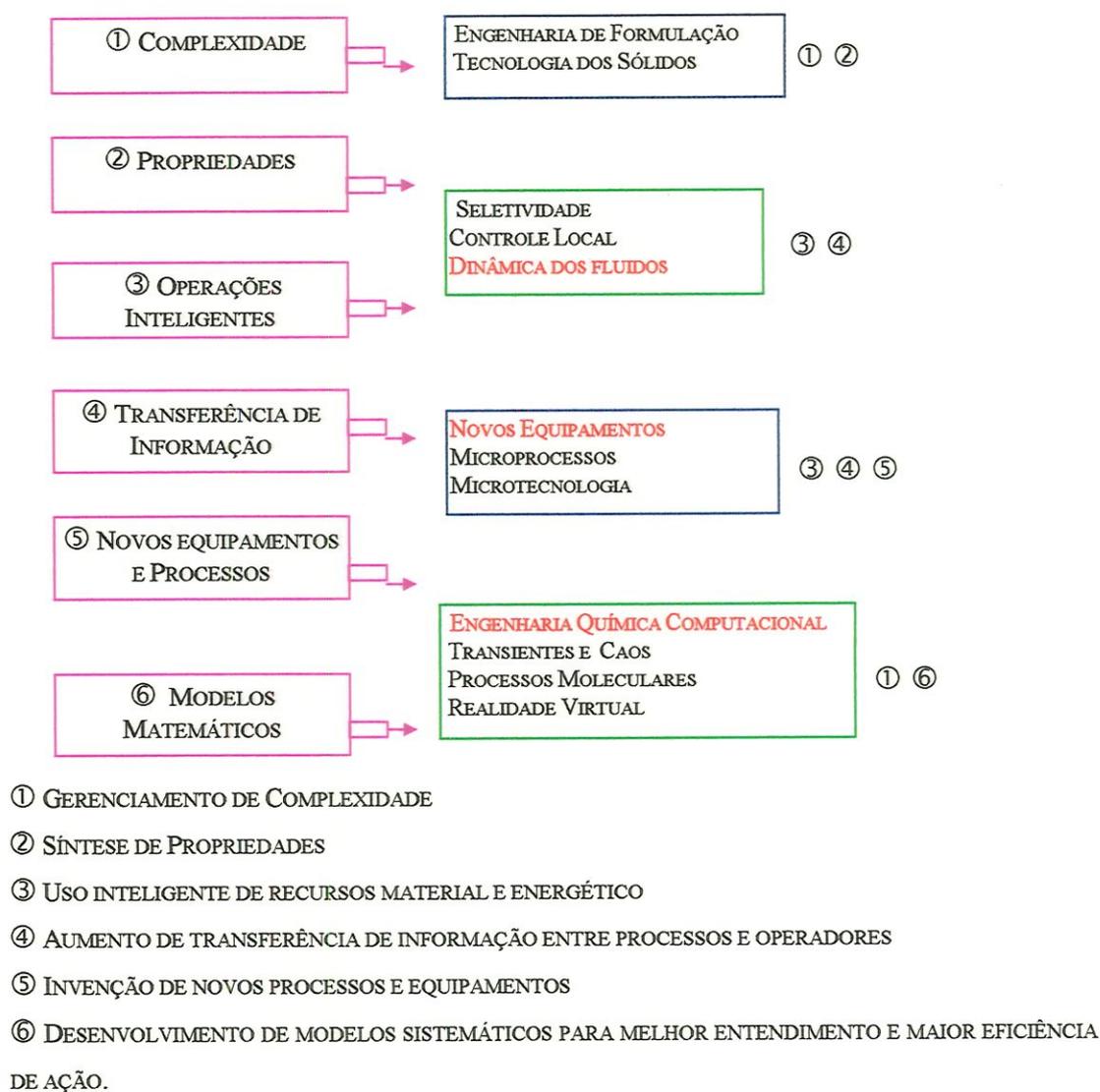
O funcionamento dos processos de tratamento aeróbicos dependem da disponibilidade de oxigênio. Portanto, uma das utilizações mais comuns da transferência de gases no campo do tratamento de água residual é a transferência de oxigênio no tratamento biológico. Dada a baixa solubilidade do oxigênio na água e, conseqüentemente, à baixa velocidade de transferência do mesmo, o oxigênio não cobre a demanda dos tratamentos aeróbios, se considerarmos apenas a sua capacidade natural de absorção pela água. Isso também vale para a dessorção de compostos voláteis e semi-voláteis oriundos desses mesmos processos. Em decorrência disso surgiu a necessidade de construção de aeradores, de variadas formas, com seus diferentes graus de eficiência (METCALF, (1985).

LANKFORD (1974)<sup>12</sup> *apud* GIBBON (1974) diz que as propostas de estudos sempre recaem na eficiência ou no custo dos equipamentos envolvidos, cujas comparações só são possíveis *via* parâmetros obtidos da literatura. Desta forma, o desempenho dos sistemas de aeração podem ser medidos em função de sua taxa de troca interfacial. O referido autor mostrou em suas conclusões que o custo total desses equipamentos é função de três componentes principais: custo de capital, custo de manutenção e custo operacional em que as curvas de custo total, em função da capacidade de aeração para vários esquemas (aeração superficial, borbulhamento e outros) dependem da capacidade de tratamento em questão. Concluiu também que para qualquer carga orgânica a ser tratada os aeradores mecânicos de alta velocidade sempre são os que apresentam menores custos totais/ano.

---

<sup>12</sup>LANKFORD, D. (1974): Cost-Effectiveness Comparison of Aeration Systems for Use in Activated Sludge Treatment of Sewage. Chapter 7. pp- 65-88. In: *Aeration of Activated Sludge in Sewage Treatment*

VILLERMAUX (1995) comenta que ao se elaborar uma revisão na literatura sobre equipamentos de mistura envolvendo a transferência de gases em líquidos e misturadores seremos capazes de reconhecer facilmente “peças antigas” que são similares àquelas que usamos atualmente, mostrando o pequeno progresso que tem sido feito nos projetos de equipamentos para as operações unitárias. Isso representa cerca de 90 anos de projetos nas áreas de destilação e mistura. Comparando com outras áreas envolvidas com escoamento de fluidos, como é o caso da aeronáutica, verificamos que as outras áreas experimentaram um desenvolvimento bem maior. VILLERMAUX (1995) sugere seis áreas importantes para o futuro direcionamento das pesquisas como é mostrado pela figura 3.3.



**Figura 3.3:** Desafios na pesquisa da Engenharia Química. Fonte: VILLERMAUX (1995). Os três temas referentes a este trabalho encontram-se destacados em vermelho.

### 3.15 EQUAÇÕES BÁSICAS UTILIZADAS EM TANQUES DE MISTURA

Todas as discussões referentes a este trabalho empregam os tanques de agitação construídos por CUNHA (1993), dotados de impulsor rotativo axial de seis pás planas inclinadas 45° com relação à vertical, cujos detalhes construtivos foram fundamentados nos padrões de BATES (1963). Este autor apresenta uma equação geral fundamentada em razões adimensionais, na forma:

$$\frac{Pg_c}{\rho N^3 D^5} = \zeta \left( \frac{\rho N D^2}{\mu} \right)^a \left( \frac{N^2 D}{g_c} \right)^b \left( \frac{T}{D} \right)^c \left( \frac{Z}{D} \right)^d \left( \frac{c}{D} \right)^e \left( \frac{P}{D} \right)^f \left( \frac{N}{D} \right)^g \left( \frac{l}{D} \right)^h \left( \frac{n_2}{n_1} \right)^i \quad (3.40)$$

onde  $P$  = potência,  $\rho$  = massa específica,  $\mu$  = viscosidade dinâmica do líquido,  $N$  = frequência do impulsor,  $g$  = aceleração da gravidade,  $D$  = diâmetro da turbina,  $c$  = distância do impulsor ao fundo do tanque,  $Z$  = profundidade da coluna de água,  $l$  = largura da turbina,  $T$  = diâmetro do tanque e  $n$  = número de pás da turbina.

A variável dependente da equação 3.40 (1º membro) caracteriza o desempenho do equipamento e é conhecida como número de potência ( $N_P$ ). O primeiro termo do segundo membro é o número de *Reynolds* e o segundo é o número de *Froude*. Todos os outros termos da equação indicam qualidades geométricas do sistema e do impulsor, tomando como base um equipamento padrão. Uma vez estipulada a geometria do sistema de forma que as relações permaneçam constantes e garantindo a não presença de vórtices, de forma que o número de Froude permaneça constante, a equação 3.65 pode ser simplificada para:

$$\frac{Pg_c}{\rho N^3 D^5} = C_1 \left( \frac{\rho N D^2}{\mu} \right)^a \quad (3.41)$$

BATES (1963) executou vários experimentos, construindo curvas para cada tipo específico de equipamento (hélices), com as quais mostrou que para todas as geometrias de hélices (impulsores) o número de potência é uma constante (gráfico di-logarítimo) a partir de um certo valor do número de Reynolds da equação 3.41<sup>13</sup>. Para as características construtivas usadas por CUNHA (1993) e MOMESSO (1996), o valor do número de Reynolds crítico (a partir do qual  $N_P$  é constante e  $\cong 1,3$ ) é cerca de 1000.

<sup>13</sup> HSU *et al.* (1997) têm realizado estudos semelhantes utilizando a análise dimensional para avaliar variáveis geométricas e operacionais em tanques agitados com indução de gás no corpo líquido.



Assim, toda a faixa de agitação utilizada por ambos os autores permaneceu acima deste número de Reynolds, de modo que utilizaram o valor mencionado de  $N_p$ .

A potência dissipada, ou a taxa de dissipação de energia, está diretamente associada com a eficiência de troca na interface ar-água dos tanques de mistura e é por isso mesmo uma variável importante para ser avaliada, com o auxílio no modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ , na previsão dos processos de troca. A vantagem de usar equipamento padronizados é que pode-se fazer comparações dos processos de troca mais, similarmente aos estudos de HARVEY e GREAVES (1982a,b), RANADE *et al.* (1989), RANADE *et al.* (1990). Tais autores apresentaram uma revisão sobre escoamentos gerados por turbinas de disco, tanto no contexto experimental quanto no computacional e fizeram comparações entre ambos os estudos, sempre utilizando padronização geométrica. Por outro lado RANADE *et al.* (1989a,b) fizeram um trabalho semelhante utilizando turbinas de seis pás planas, com as mesmas características de CUNHA (1993) e MOMESSO (1996). Uma das melhores revisões sobre escoamentos com impulsores axiais em tanques de mistura, segundo RANADE *et al.* (1989a) foi feita por FORT (1986), o qual fez um levantamento bibliográfico geral sobre as características do escoamento nesses sistemas.

### 3.16 ESCOAMENTO EM TANQUES DE MISTURA E PARÂMETROS TURBULENTOS RELEVANTES

A tentativa de descrever o escoamento de fluidos newtonianos (água) em tanques com inibidores de vórtices (estatores), tem sido abordada nas três últimas décadas, principalmente com ênfase em aspectos relativos à taxa de dissipação de energia local, com freqüentes observações de que a energia por unidade de volume ou massa,  $\varepsilon$ , é geralmente um critério da agitação útil, particularmente em processos onde uma fase é dispersada em outra. Portanto, o que se apresenta doravante é uma sequência cronológica de trabalhos na área, que norteou a evolução das idéias e das metodologias adotadas, juntamente com os parâmetros que cada autor considerou relevante.

CUTTER (1966) sugeriu que a isotropia local fornece uma explicação para o comportamento da intensidade dos turbilhões de pequena escala em escoamentos turbulentos. Em números de Reynolds suficientemente altos as características dos turbilhões nesta escala são dependentes somente da taxa de dissipação de energia local e da viscosidade. A intensidade de seus turbilhões passa a ser uma função

somente do seu tamanho e da taxa local de dissipação de energia por unidade de massa,  $\varepsilon$ . Existem muitos relatos na literatura indicando que o escoamento está distante de ser homogêneo, mas quase não existem dados quantitativos turbulentos em tanques sobre o assunto (SACHS e RUSHTON, 1954 *apud* CUTTER, 1966). O importante aspecto do trabalho de CUTTER (1966) foi a busca de uma descrição do escoamento da água com ênfase na taxa local de dissipação de energia, utilizando um método fotográfico para estimá-la. Demonstrou também que as velocidades médias tangencial e radial são aproximadamente iguais na região próxima da turbina e que a velocidade tangencial decresce mais rapidamente do que a radial com o aumento da distância radial.

MUJUMDAR *et al.* (1970) mediram velocidades médias e velocidades de flutuações radiais em escoamento em tanques cilíndricos agitados por turbinas. Foram obtidos também as funções de auto-correlação, espectro de energia e amplitude de funções de densidade de probabilidade das flutuações de velocidade radial. Foi determinado que a amplitude da componente periódica decresce com a distância radial a partir da extremidade da turbina, fato usado para corrigir as intensidades de turbulência medidas. Os parâmetros de turbulência foram medidos usando um anemômetro de fio quente à temperatura constante usando ar como fluido dentro do tanque. A técnica de fio quente foi usada pela facilidade de operação e resposta de frequência extremamente boa, na época. Segundo MUJUMDAR *et al.* (1970) o espectro de energia e a taxa de dissipação de energia mostram grandes picos devidos à frequência de passagem das turbinas. A macro-escala, computada a partir do coeficiente de correlação, foi determinada como sendo da mesma ordem de grandeza da largura das pás das turbinas que geraram a turbulência.

DESOUSA e PIKE (1972) estudaram escoamentos em tanques de mistura com um impulsor de turbina, onde foram medidos perfis de velocidade usando um tubo de Pitot tri-dimensional. Os autores compararam medidas reportadas na literatura para água e ar, variando o diâmetro do impulsor e uma velocidade, para diferentes diâmetros do tanque. Detectaram que no restante do tanque, fora da região da turbina, existe um campo de escoamento tridimensional, de baixa velocidade; e que o centro de circulação não corresponde a um ponto verdadeiro de estagnação como havia motrado NAGATA *et al.* (1959)<sup>14</sup>, pois nesta zona indicada apenas parecia existir quando as linhas de corrente eram plotadas no plano  $r$ - $z$ . Assim, os modelos bi-

---

<sup>14</sup> Nagata, S., Yamamoto, K., Hashimoto, L. e Naruse, Y., Mem. Fac. Eng., 21, 260, Kyoto University (1959).

dimensionais do escoamento somente previram qualitativamente o escoamento. Os autores concluíram que nenhum modelo foi desenvolvido para descrever satisfatoriamente o escoamento em tanques agitados.

DESOUZA e PIKE (1972) também fizeram uma revisão sobre os esquemas e técnicas de medidas de velocidade em escoamentos deste tipo, apontando as vantagens e desvantagens do uso de cada uma delas. Apontaram, que o esquema ideal seria aquele que não interferisse no campo de escoamento e permitisse a medida de velocidade instantânea, ou seja, o medidor de velocidade *laser doppler*. No entanto, em seu trabalho foi escolhido o esquema do tubo de Pitot. Baseados nos resultados da literatura sobre tanques de mistura, reportaram que estes não poderiam ser modelados em uma única região. Ele deveria ser separado em várias regiões e um diferente modelo usado para descrever o escoamento em cada região. Os autores dividiram o tanque em seis regiões. Concluíram, ainda, que o escoamento que retorna da corrente do impulsor ocupa uma região estreita nas paredes do tanque com uma espessura de aproximadamente 16% do diâmetro do tanque. Este fato conduziu à prática comercial de uso da largura de baffles de 10% do diâmetro do tanque em projeto de reatores de mistura.

VAN'T RIET *et al.* (1975) estudaram as descargas de turbina tipo Rushton com seis hélices, usando medidas fotográficas para a velocidade, a fim de analisar o sistema de esteiras de vórtices em água e glicerol. Os autores concluíram a partir da determinação dos campos de pressão em duas diferentes escalas, que o número de Reynolds seria um parâmetro suficiente para execução de um projeto em escala real. Verificaram também que a aceleração centrífuga e a taxa de cisalhamento associadas com o trajeto dos vórtices é muito maior do que o indicado na literatura consultada. Os autores indicaram que, embora o trabalho tenha sido restrito a uma simples fase de escoamento, os resultados apresentados são de importância para a maioria das aplicações de turbinas de disco para operações de dispersão.

VAN'T RIET *et al.* (1976) da mesma forma que o trabalho anteriormente mencionado, mediram velocidades, para o equipamento já descrito, com uma sonda de filme quente cônica estacionária, a fim de conhecer o campo de escoamento relacionado com o impulsor. Três aspectos importantes foram levantados: (a) existe uma grande periodicidade na velocidade próxima da turbina quando medida por uma sonda estacionária, e está relacionada com a frequência de passagem da mesma; (b) a intensidade turbulenta varia grandemente com distância vertical a partir do plano do

agitador; e (c) o espectro de energia baseado na frequência é inconsistente com a teoria de turbulência isotrópicas. Concluiu-se que, a maior parte das flutuações de velocidades detectada deve ser considerada como pseudo-turbulenta. Portanto, a determinação de parâmetros turbulentos tais como tamanho de turbilhão, intensidade turbulenta, espectro de energia, não pode ser feita somente através de medidas de velocidades com sonda estacionária. Tais valores passam a ser mais um indicativo da influência dos vórtices do que serem propriamente características genuinamente turbulentas. Certamente não podem ser usadas como uma base para prever desempenhos de mistura ou de dispersão. Os autores acrescentam ainda que medidas de parâmetros de turbulência com sondas estacionárias podem ser feitas, porém a uma certa distância da turbina.

TATTERSON *et al.* (1980) estudaram a visualização estereoscópica dos escoamentos induzidos por turbinas de pás inclinadas. A técnica foi usada para estudar o movimento de partículas nos campos de escoamentos. Foram descritas observações de natureza geral e de natureza específica, tanto para turbinas em escala de bancada como industrial. Foram observadas significantes diferenças, sugerindo que os escoamentos em escala real e de bancada não são facilmente comparáveis entre si. A visualização estereoscópica, neste caso, foi anteriormente aplicada para medir estruturas coerentes na camada limite turbulenta, e posteriormente pouco modificada pelos autores para estabelecer os escoamentos de grande escala da região do impulsor para turbinas de pás inclinadas. As principais conclusões dos referidos autores foram que os escoamentos das turbinas em escala industrial eram menos caóticos e mais coesos do que aqueles de pequena escala. O escoamento predominante no tanque de escala industrial foi o sistema de grandes esteiras de vórtices na extremidade da turbina.

JOSHI *et al.* (1982) descreveram, através de uma revisão, as características hidrodinâmicas e de transferência de calor e massa em equipamentos agitados mecanicamente. Os escoamentos descritos foram os do tipo padrão<sup>15</sup> (em fase simples) para vários tipos de turbinas: *tipo disco, de pás inclinadas*. Foi estudada a

---

<sup>15</sup> Os escoamentos médios gerados por impulsores com geometria padrão produzem também escoamentos padrão. Para impulsores tipo *PTD* forma-se apenas um "loop" ao longo de um dos lados simétricos do tanque, com escoamento essencialmente axial, como é o caso do presente trabalho. No caso de se utilizar um impulsor de disco com pás planas (pás perpendiculares ao disco), o escoamento normalmente é radial, formando dois "loops": um abaixo do impulsor e outro acima do impulsor, ambos em sentidos contrários um do outro. Referências que demonstram as características desses escoamentos em função da geometria do sistema podem ser vistas em MAO *et al.* (1997), ISMAILOV *et al.* (1997), DICKEY *et al.* (1992), SMITH (1997), entre outros.

velocidade mínima do impulsor requerida para que houvesse aeração superficial e como esta poderia ser prevista. Foram descritas as diferentes estratégias de operação de contactores agitados mecanicamente, bem como discutidas a importância do assunto e as lacunas de conhecimento na literatura disponível. No caso específico da turbina de pás inclinadas ou como é popularmente conhecida turbina de escoamento axial, foi concluído que as informações disponíveis são escassas. Porém, uma contribuição do estudo de JOSHI *et al.* (1982) para este trabalho foi dada na seção de aeradores superficiais que são utilizados para tratamento de águas residuárias, onde menciona aeradores do tipo turbina com a mesma geometria e escoamento que foi modelado no presente trabalho. Em suas recomendações os autores ainda fizeram alusão ao campo de velocidade e aos campos turbulentos (escala e intensidade) os quais necessitam ser estudados para sistemas gás-líquido. Além disso, concluíram ainda que estudos comparativos de desempenho de vários projetos de aeradores superficiais não estavam disponíveis na literatura publicada.

HARVEY e GREAVES (1982a) estudaram o escoamento turbulento em um tanque agitado com o objetivo de prever este escoamento. Na primeira parte do trabalho foi proposto um método para modelar o escoamento (fase simples) gerado por um impulsor de turbina de disco em um tanque com baffles (inibidores) tipo padrão, pela aplicação do modelo turbulento  $\kappa$ - $\varepsilon$ . Os autores buscaram dar com isso um primeiro passo em direção ao desenvolvimento de procedimentos para prever uma ampla faixa de processos em tanques agitados, incluindo aqueles associados com transferência de calor e massa, reação química, etc. A parte - II do trabalho (HARVEY e GREAVES, 1982b) é a descrição dos resultados do modelo bi-dimensional do escoamento turbulento proposto na parte - I. Os autores mostraram que houve apenas uma concordância qualitativa entre as previsões e os dados experimentais para as três componentes de velocidades médias, nos locais onde tais dados estavam disponíveis. Por isso, a ausência quase total de dados experimentais tornam difíceis as previsões para comparações em escoamentos turbulentos. As conclusões principais referentes à parte - I são: (a) as medidas de turbulência em tanques agitados são muitas vezes confinadas à corrente do impulsor, concentrando-se principalmente na distribuição de  $k$ ,  $U$  e  $W$ , (b) embora a característica quantitativa da turbulência da corrente do impulsor não tivesse sido ainda resolvida, ficou claro que a corrente do impulsor arrasta consigo um campo turbulento fortemente não-homogêneo; (c) os gradientes normais não mensuráveis da velocidade de flutuação são a causa da ausência de qualquer medida disponível de  $\varepsilon$ , (d) a resultante de seis equações diferenciais não-lineares é elíptica e necessita ser resolvida numericamente. As

principais conclusões referentes à parte - II são: (a) o modelo usado foi simples devido ao campo de escoamento ter sido admitido bi-dimensional e as condições de contorno serem tais que limitavam severamente o número de parâmetros governantes para dois: o número de bombeamento do impulsor e a velocidade radial<sup>16</sup>; (b) a turbulência próxima à turbina era altamente não-homogênea enquanto existia uma turbulência relativamente homogênea na maior parte da zona de circulação; (c) globalmente, as previsões sugeriram que a taxa líquida de dissipação de energia turbulenta foi igualmente dividida entre a corrente do impulsor e a do corpo líquido; (d) somente 15,6% da energia total introduzida foi aparentemente dissipada pela turbulência (isto é, um tanto quanto mais baixo do que para o sistema real devido à ausência de gradientes na direção -  $\theta$ ).

DAVIES e LOZANO (1984) fizeram um estudo sobre turbulência e renovação superficial em um tanque com superfície limpa. Discutiram sobre as incertezas da superfície limpa ser ou não verdadeiramente turbulenta, além de indicar estudos sobre distribuição de tempos de residência dos elementos fluidos na superfície que têm sido amplamente estudados, como no trabalho de HIGBIE (1935) e DANKWERTS (1951). O trabalho de DAVIES e LOZANO (1984) apresenta medidas diretas dos parâmetros turbulentos do líquido no plano da superfície de um tanque agitado. Obtiveram as distribuições dos tempos de residência dos turbilhões na superfície. As principais conclusões obtidas foram: a região da superfície da célula agitada é turbulenta; a distribuição dos grandes turbilhões (escala integral) próxima à superfície concorda bem com a função distribuição de Dankwerts, embora exista uma tendência para os grandes turbilhões serem substituídos mais lentamente do que previa a equação de renovação superficial. Ou seja, os pequenos movimentos ao longo da superfície são menos importantes na transferência de massa do que são os grandes movimentos que estão relacionados com a "renovação superficial."

PLACEK e TAVLARIDES (1985) utilizaram o conceito de esteiras de vórtices, originalmente introduzido por VANT'RIET (1975), a fim de medir a velocidade média e a intensidade de flutuações de velocidades periódicas em escoamentos de descargas produzidas por impulsores de turbina de disco com hélices verticais acopladas. Os dados calculados do perfil de velocidade média e das flutuações de velocidade periódicas concordaram com dados anteriormente publicados. O trabalho desses

---

<sup>16</sup> Normalmente o desempenho do impulsor é caracterizado pelo seu número de bombeamento,  $N_Q = 4\pi U z_1 / 3ND^2$ , onde  $D$  é o diâmetro da turbina,  $N$  é número de revoluções/tempo,  $U$  é a velocidade radial,  $z_1$  é uma coordenada axial, porém constante na condição de contorno do impulsor.

autores tinha como principal interesse a economia de energia e melhora da qualidade do produto envolvido no processo de mistura. Os autores mostraram que modelos mais detalhados para os escoamentos hidrodinâmicos dentro da região das turbinas de agitadores em tanques são desejáveis.

Os autores sugeriram, ainda, que o seu modelo poderia ser aplicado em trabalhos subsequentes para desenvolver modelos de escoamentos hidrodinâmicos dentro de um tanque agitado por turbinas, o qual seria útil para modelar padrões de macro-escoamento, dissipação de energia, micromistura de espécies presente no fluido e, por extensão, modelagem de sistemas multifásicos. O modelo é baseado na similaridade geométrica das esteiras de vórtices atrás das pás do impulsor.

LAUFHÜTTE e MERSMANN (1987) discutiram sobre as condições do escoamento ser ideal, que são comumente assumidas no projeto de reatores. Em muitos casos a cinética formal, que constitui as bases da modelagem de reações, é tão incerta que aquela idealização do campo de escoamento pode ser aceita. Na prática, no entanto, desvios da idealidade ocorrem e pode ser necessário considerar as condições reais de escoamento. Em geral, uma distinção é feita entre processos de macro e micro mistura. Os autores tiveram interesse em estabelecer o tempo de mistura mínimo para a distribuição total de concentração em tanques de mistura. Concluíram que na modelagem de várias reações químicas simultâneas o processo de macro-escala somente não é suficiente. Os autores descrevem tópicos como os referentes à micromistura, à determinação da taxa de dissipação de energia local, métodos de medidas e sistemas de investigação para o fenômeno de escoamento turbulento usando LDA, determinação das distribuições de flutuações de velocidade das diferentes configurações de mistura (micro e macro-escalas). A taxa de dissipação de energia local,  $\varepsilon$ , foi o parâmetro mais importante do modelo. Concluem ainda que, levando em conta a insuficiente quantidade de informação sobre este parâmetro chave em reatores agitados, o trabalho permitiu uma primeira determinação da distribuição da taxa de dissipação local  $\varepsilon$  em diferentes configurações de reatores de mistura. Já que esta não é uma quantidade medida diretamente, argumenta-se que uma equação adequada para a sua determinação deve ser encontrada primeiro.

WINARDI *et al.* (1988) visualizaram o escoamento ao redor de uma turbina de duas pás planas verticais. Os resultados mostraram que o escoamento entre as pás da turbina é uma alternância de cinco padrões distintos que são substituídos um pelo outro. A distribuição de velocidades dos escoamentos estimados a partir da

visualização por quadros foram bastante diferentes das distribuições médias obtidas. As distribuições de velocidades em volta das turbinas foram calculadas a partir do movimento de partículas de traçadores em movimento. Quanto ao escoamento no tanque como um todo, este foi considerado mais complicado do que na região da pá da turbina, contrariando o que diz a maioria dos autores que trabalharam com tanques de mistura. WINARDI *et al.* (1988) citam, por exemplo, os bem conhecidos vórtices verticais que aparecem e desaparecem atrás das pás da turbinas e inibidores, em volta do eixo do impulsor e na superfície do líquido. Os fluxos reversos à direção principal do escoamento nas regiões distantes do impulsor também foram observados. Os autores procuraram mostrar que os escoamentos reais em tanques são muito instáveis e afirmaram que o escoamento em tanques poderia ser do tipo instável, sendo composto de muitos tipos de escoamentos turbulentos distribuídos localmente no tanque ao mesmo tempo, sendo que essa distribuição mudaria continuamente no tempo.

STENBERG e ANDERSON (1988a) descreveram um método para avaliar o coeficiente de transferência gás-líquido,  $k_L a$ , em um tanque agitado a partir de um medidor de resposta transiente. O método envolveu medidas de concentração em várias posições da fase líquida e um modelo de dispersão axial para a fase gasosa. Os resultados apresentados mostraram as diferenças entre os métodos de avaliação. Um dado importante do trabalho foi a observação de que a transferência de massa próxima ao impulsor era muito maior do que no restante do tanque. Apesar disso, devido ao curto período de tempo, isto teve pouco efeito sobre o coeficiente de transferência gás-líquido avaliado. Entretanto, a principal falha do método usado foi a falta de dados precisos do tempo de residência da fase gasosa (tempo de circulação no seio líquido).

STENBERG e ANDERSON (1988b) modelaram a transferência de massa gás-líquido em tanques agitados, com geometria similares, sendo que os coeficientes de transferência foram determinados pela medida em estado não estacionário de taxas de dissolução de oxigênio na água. O planejamento experimental e seu efeito nos modelos de escala real foram criticamente discutidos. Foram reportados os resultados dos efeitos do tamanho, velocidade do impulsor, energia introduzida e velocidade superficial do gás sobre o coeficiente de transferência de massa. Os dados foram ajustados para os modelos, sendo também apresentados modelos que pudessem reduzir o número de parâmetros e, em adição, busca o melhor entendimento do fenômeno que determina a melhor transferência de massa. Uma análise estatística foi

aplicada no sentido de separar os principais efeitos. As conclusões foram que a modelagem de transferência de massa gás-líquido é uma tarefa ainda muito difícil, dadas as limitações do entendimento hidrodinâmico.

ARRUA *et al.* (1991) estudaram a transferência de massa em tanques agitados a fim de medir o coeficiente de transferência de massa entre bolhas de gás imersas em líquido, onde foram envolvidos os processos de dessorção. Eles utilizaram um método químico denominado de pseudo-estacionário que elimina a necessidade de medir concentração na fase líquida. Seus dados sugeriram uma relação linear entre o coeficiente de transferência de massa e a rotação do impulsor para uma faixa de rotação entre 105 e 670 rpm, com diferentes taxas de fluxos de gás. Esta última foi oriunda de um sistema simples de borbulhamento de gás hélio, localizado sob a parte inferior das pás do impulsor. Entretanto, os referidos autores reportam-se à literatura da área afirmando que os coeficientes de transferência de massa dependem de aspectos específicos do sistema de agitação, incluindo o *design* e localização do aspensor e dos inibidores, forma e localização, diâmetro e altura do tanque, indicando que esses são os principais fatores que têm resultado em grandes diferenças entre os dados reportados. Assim, mais uma vez fica claro que a geometria do sistema é um fator limitante nesses tipos de comparação, onde uma simples diferença no detalhe geométrico pode causar grandes diferenças entre os coeficientes medidos.

KRESTA e WOOD (1991) fizeram um estudo para prever o escoamento turbulento tridimensional em tanques agitados, usando um impulsor tipo turbina de disco Rushton. Basicamente os autores estenderam um modelo desenvolvido por KOLAR (1982) *apud* KRESTA e WOOD (1991), pelo uso do modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  para obter estimativas diretas de  $\kappa$  e  $\varepsilon$  na periferia das pás. Simulações tridimensionais permitiram um tratamento realístico dos inibidores. O número de parâmetros requerido para a aplicação do modelo foi reduzido a dois: a velocidade rotacional e o diâmetro do impulsor. Os autores mostraram que houve uma excelente concordância entre a modelagem e os dados experimentais publicados recentemente. Isto foi particularmente verdadeiro na zona de descarga do impulsor, onde os detalhes do comportamento previsto da energia cinética turbulenta e taxa de dissipação de energia estavam em concordância quantitativa com os dados disponíveis.

RANADE *et al.* (1992) fizeram comparações de escoamentos axiais de impulsores usando um anemômetro a laser Doppler (LDA). Os autores estudaram a influência da forma para oito impulsores de escoamento axial em tanques agitados

usando o LDA. Em todos os casos a razão entre os diâmetros do tanque e do impulsor foi de 1/3 (semelhantes ao de CUNHA, 1993) e os impulsores localizados no centro do tanque. Os escoamentos gerados pelos diferentes impulsores foram comparados em termos de velocidades médias, energia cinética turbulenta, efetividade de bombeamento, e eficiência hidráulica. Os dados de escoamento medidos próximos ao impulsor foram apresentados na forma adequada para especificar as condições de contorno ao modelo numérico. O modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  mostrou ser adequado para prever o escoamento do tanque para todos os impulsores. As principais conclusões acerca do trabalho foram que os diferentes impulsores de escoamentos axiais mostraram marcadamente diferentes escoamentos na vizinhança da parede e no corpo líquido. O modelo  $\kappa$ - $\varepsilon$  pode ser usado para simular escoamento gerado por esses tipos de impulsores. Dois parâmetros foram definidos para caracterizar esses impulsores. A eficiência hidráulica e a efetividade de bombeamento. Concluem ainda dizendo que uma investigação sistemática com relação a estrutura de escoamento e mistura está ainda em desenvolvimento.

ZHU e GREEN (1992) ao estudarem trabalhos publicados na literatura da área sobre misturadores gás-líquido de alto desempenho no processo de transferência de massa, mostraram uma considerável discrepância entre correlações de diferentes autores, sugerindo outros estudos melhor embasados para entender o assunto neste campo. Os reatores de alto desempenho são adequados para reações de cinéticas rápidas. Neste caso as principais conclusões foram que há uma tendência para o estudo e pesquisa para esse tipo de reator; sendo que a maioria desses estudos foram em sistemas confinados para ar-água. Ademais, a investigação dos efeitos de propriedades físicas tais como viscosidade, tensão superficial e comportamento de coalescência é falha. Os estudos em equipamento de baixa intensidade, tais como os tanques de mistura, ou colunas de borbulhamento não podem ser diretamente aplicados para misturadores de alta intensidade devido às diferentes interações hidrodinâmicas.

KUNCEWICZ (1992) buscou uma solução tridimensional da equação de Navier-Stokes numericamente em tanques de mistura. A solução se refere a impulsores de pás e turbinas operando em regime de mistura laminar, que é de interesse teórico para esta pesquisa e pouco prático no momento.

DICKEY *et al.* (1992) descreveram os campos de escoamento produzidos por escoamentos padrão, afirmando que as características de descarga impostas pelos

impulsores rotativos determinam o padrão de circulação do fluido. Por exemplo, impulsores de escoamento radial criam dois “loops” de circulação, enquanto que os escoamentos axiais produzem vários tipos de “loops” simples. Como consequência imediata, idênticos impulsores em diferentes tanques podem produzir diferentes padrões de escoamentos. Os referidos autores tecem ainda comentários sobre a influência do tamanho da turbina no padrão de escoamento do seio do líquido. Descreve que o nível do líquido não deve ultrapassar 1,2 vezes o diâmetro do tanque. Se isso ocorrer, deve-se introduzir mais um impulsor. Já o efeito da viscosidade é um complicador a mais e influencia drasticamente o padrão de escoamento para qualquer tipo de impulsor. Os autores concluem que a diversidade de aplicações e tipos diferentes de misturadores permitem exceções para todas as regras para os escoamentos e tipos de tanques estudados por eles.

KRESTA e WOOD (1993) estudaram os campos de escoamento produzidos por turbinas de pás planas inclinadas 45° em tanques agitados, a caracterização da turbulência e a estimação da taxa de dissipação de energia. As principais conclusões dos autores são: A aproximação isotrópica local foi confirmada pela similaridade das três componentes de flutuação de velocidade e pela similaridade das três escalas de tempo integrais. Existe também uma grande necessidade de medidas da taxa de dissipação de energia no corpo do fluido, para várias geometrias, para um melhor entendimento da distribuição do consumo de energia no tanque. Até que esta distribuição de consumo de energia seja melhor entendida e quantificada as correlações genéricas que têm sido desenvolvidas usando o conceito de energia por unidade de volume não podem ser confirmadas.

CHAPPLE e KRESTA (1994) estudaram o efeito da geometria sobre a estabilidade de escoamentos padrão em tanques agitados. A estabilidade foi examinada através da visualização do escoamento. O grau de instabilidade<sup>17</sup>, segundo os autores, significa um parâmetro que define eficiência de mistura por meio da manutenção da direção do campo de velocidades, que pode afetar o padrão de escoamento nos tanques, tornando-os inconstantes no tempo. Neste caso, o diâmetro, o número de inibidores, as interações dos tipos de impulsores com o número de inibidores e o tipo de impulsor com o espaçamento ao fundo do tanque afetaram a estabilidade direcional do

---

<sup>17</sup> O coeficiente direcional tem sido definido para quantificar a estabilidade direcional do escoamento padrão no tempo. Este dá informações diferentes daquela da velocidade ou intensidade turbulenta (r.m.s). Ambas das quais medem a magnitude das flutuações da velocidade, mas descarta todas as informações direcionais.

escoamento. Segundo os autores, historicamente a circulação padrão (escoamento padrão) em tanques de mistura tem sido representada como um escoamento bi-dimensional estacionário. Na realidade, entretanto, o escoamento em um tanque agitado é tri-dimensional e os detalhes da circulação padrão são instáveis, variando de um instante a outro (ver, por exemplo, TATTERSON *et al.* (1980), já citado anteriormente. Assim, CHAPPLE e KRESTA (1994) buscaram formas de quantificar a instabilidade em tanques de mistura analisando como a geometria interagiu no processo de mistura em questão.

DJEBBAR, *et al.* (1996) simularam dispersão de um gás (oxigênio) em líquido com escoamento turbulento bi-dimensional e regime estacionário em tanques de mistura (software *FIPAD*). Um dos objetivos dos autores foi testar a habilidade da dinâmica dos fluidos computacional, independentemente da geometria e da escala sistema e os processos de troca via borbulhamento de ar na parte inferior da turbina. A vazão de ar era suficientemente baixa para que esta não influenciasse no escoamento provocado pela turbina. A transferência de massa foi prevista pelo uso de um modelo de dois fluidos. As condições de contorno foram discutidas, como o ponto de injeção de ar na turbina. Os resultados das simulações foram comparados com dados experimentais para os coeficientes globais de transferência volumétrico. Houve uma satisfatória concordância com os dados experimentais numa ampla faixa de condições de operação. DJEBBAR, *et al.* (1996) consideraram 4 condições de contornos gerais: impulsor, paredes, orifício de injeção no anel injetor de gás e superfície. As condições de contorno aplicada para as paredes foram as de no-slip (assumindo o perfil logarítmico de velocidade tradicional); para a fase gasosa considerou o fluxo através da parede igual a zero; a superfície livre foi considerada plana, portanto segue que a velocidade normal e os fluxos normais de  $k$  e  $\varepsilon$  reduzem-se a zero, exceto a velocidade da fase gasosa (bolhas). Os autores concluíram que as taxas de transferência de massa,  $K_i$  (volumétrico), concordou bem com os dados experimentais, mas os parâmetros principais foram a escala de comprimento turbulenta e o coeficiente de arraste das bolhas. Assim, mais uma vez a superfície foi considerada como uma superfície sólida, porém porosa. Isto é, uma vez que as bolhas chegam na superfície, elas a atravessam.

RANADE *et al.* (1996b) simularam escoamentos tridimensionais (3D) em tanques de mistura com impulsores tipo turbina *PTD*, em regime turbulento com o uso do código computacional *FLUENT*. As características geométricas foram idênticas àquelas usada por CUNHA (1993) e MOMESSO (1996), exceto a largura da turbina utilizada igual

a 0.03m ao invés de aproximadamente 0.01m. A contribuição principal do estudo de RANADE *et al.* (1996b) é a possibilidade de simular os detalhes do escoamento entre as pás do impulsor. Isso é feito usando malhas móveis e deformadas, a qual foi modelada pelo software GEOMESH (do *FLUENT* Inc., USA). Desta forma, uma vez que o escoamento, inicialmente não estacionário, torna-se estacionário dentro da região da turbina em poucas ciclos de rotação, este torna-se ciclicamente repetitivo. Neste caso, uma “fotografia” instantânea (solução em qualquer instante particular) pode descrever o escoamento dentro da região da turbina com suficiente detalhes. Entretanto, o tempo para essas simulações em regime transiente é enorme. O método também basicamente envolve tomadas instantâneas do escoamento ao longo do tanque com o impulsor em qualquer posição particular com relação aos inibidores de vórtices, sem a necessidade de qualquer informação experimental sobre as condições de contorno próximas da turbina (técnica *snapshot approach*). Tal procedimento é apontado pelos autores como uma proposta geral para várias configurações de misturadores. Entretanto, o interesse recai na região do impulsor e nada é dito sobre a superfície do fluido.

Semelhantemente ao trabalho de RANADE *et al.* (1996b), RANADE (1997) fez novamente uso do código computacional *FLUENT* para simular escoamentos tridimensionais (3D) em tanques de mistura com impulsores, só que para o tipo turbina Ruhston, em regime laminar e turbulento. A rotação do impulsor foi modelada em função de termos fontes apropriados nos contornos próximos ao impulsor. O modelo foi validado pela comparação com dados experimentais publicados e foi apresentado como uma proposta geral e ferramenta para projetos de misturadores. O autor discute que a turbina tem sido tratada como uma caixa preta. Esta abordagem requer condições de contorno que necessitam ser determinadas experimentalmente, bastando apenas as especificações da geometria e velocidade rotacional do impulsor. Desta forma ele concluiu seu trabalho afirmando que a sua proposta geral captura os detalhes de qualquer tipo de escoamento gerado por este tipo de impulsor sem o requerimento de dados experimentais do impulsor. Além disso, descreve uma boa concordância tanto qualitativa quanto quantitativa quando comparadas com os referidos dados da literatura. Entretanto, mais uma vez verificamos que nos estudos relacionados com tanques de mistura o maior enfoque de interesse recai sobre a região do impulsor, deixando de lado a superfície livre do fluido. Além do mais, não foi claramente mostrado com foi feito tal procedimento para implementação das condições de contorno na região do impulsor. RANADE (1997), finaliza afirmando que

existem muitas limitações para o tipo de modelagem utilizada (*snapshot approach*) e tais simulações são úteis para previsões preliminares.

KAWASE *et al.* (1997) estudaram o coeficiente de transferência de massa volumétrico em tanques com turbinas de disco, dotado de aspersor de gás instalado abaixo do impulsor rotativo. Os fluidos estudados foram os newtonianos e não-newtonianos, com três fases: gás, líquido e sólido. O coeficiente de transferência apresentou um decréscimo de seu valor com a presença de partículas sólidas na água, com vazão de gás introduzida e velocidade do impulsor constantes para cada experimento. A explicação é que com a presença das partículas sólidas há um decréscimo da intensidade turbulenta e da mobilidade da interface, aumentando a viscosidade efetiva do escoamento. Entretanto, isso não ocorreu quando o fluido era não-newtoniano.

SMITH (1997) estudou o escoamento bi-dimensional em tanques de mistura com regime transiente, usando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ . O objetivo foi simular uma descrição realística do comportamento da mistura de lodo (dispersão de partículas) em tanques de escala industrial, portanto bastante distinto dos tanques descritos por CUNHA (1993). SMITH (1997) incorporou uma solução estratégica única que efetivamente desacoplou os cálculos da turbulência a partir da solução da equação de momento. Assim, além de usar um código computacional, o autor desenvolveu pesquisas particulares para facilitar a interface dos cálculos de transporte de partículas com os cálculos de velocidade dos fluidos. Portanto, o código original foi “modificado” para testar modelos físicos e compatibilizá-los com os métodos numéricos usados. Os dados, obtidos a partir da modelagem computacional, estavam em acordo com observações experimentais de forma qualitativa. Comparações exatas não foram obtidas até aquele momento. O autor comenta ainda, oportunamente, que as condições de contorno do impulsor e o modelo  $k-\varepsilon$  foram as partes mais falhas da simulação e esta só poderia ser melhorada pelo fornecimento das condições de contorno mais detalhadas nas vizinhanças do impulsor. Conclui também que o escoamento bi-dimensional estudado é menos caro computacionalmente, apresentando uma maior facilidade de ser visualizado e que esta simplificação tem sido utilizada com sucesso em muitos estudos sobre tanques de mistura, como nos trabalhos de HEAVES e GREAVES (1992b). Desta forma, SMITH (1997) utilizou a mesma abordagem que HARVEY e GREAVES (1982a,b), com pequenas modificações na abordagem da velocidade tangencial. Adotou a condição de contorno no-slip nas paredes sólidas do tanque, e considerou tensão na superfície líquida igual a zero

(interface ar-água) e também na simetria (linha central do tanque). Seus resultados indicaram que a energia cinética turbulenta,  $k$ , é maior próxima da superfície inferior da turbina onde a velocidade é maior, como esperado, e decresce rapidamente próximo à parede do tanque e na superfície livre, onde a velocidade é baixa. O mesmo acontece com a taxa de dissipação de energia cinética,  $\varepsilon$ .

SMITH (1997) na verdade fez as considerações convencionais das condições de contorno na superfície com  $k$  e  $\varepsilon$ . Comenta ainda sobre a falta de dados experimentais apropriados também para a região da turbina. Mas, entre todas as referências atuais citadas neste capítulo, em que foram propostos os estudos com simulação numérica com tanques de mistura, esta foi a única que se referiu à superfície livre explicitamente, demonstrando a falta de interesse com relação a esta, uma vez que sempre o fenômeno de interesse é a região da turbina.

Como pôde ser visto, a revisão sobre experimentos e simulação em tanques de mistura apontam para uma gama enorme de pontos de vista sobre o tema. Mesmo as inovações numéricas indicadas pelas referências mais atuais sobre o assunto apresentam muitas limitações do ponto de vista dos dados experimentais comparativos com as simulações, seja no sentido da abordagem das condições de contorno, bem como do ponto de vista das limitações dos métodos computacionais. Algumas referências citam a necessidade de trabalhar com escoamentos tri-dimensionais. Outros sugerem que as simulações bi-dimensionais são suficientes para simular os escoamentos em aplicações na engenharia. Algumas referências não se preocupam com os detalhes da turbina em si. Mas outras a tratam como assunto principal, dependendo dos objetivos. Portanto, se levarmos em conta as dificuldades inerentes aos escoamentos em tanques de mistura, teremos também que nos confrontar com os problemas inerentes aos processos de troca de massa na superfície, que em nenhum momento deste capítulo foi mostrada a abordagem adequada para o tema de interesse para este trabalho.

Entretanto, como já foi discutido anteriormente, todas as referências foram úteis na análise qualitativa dos escoamentos gerados pelas simulações dos escoamentos em tanques de mistura.

### 3.17 A FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DA TURBULÊNCIA

Na presente apresentação, interessam as seguintes grandezas de velocidades ( $U, W$ ), de concentração ( $C$ ) e de pressão ( $P$ ). Para calcular os valores médios das distribuições flutuantes de velocidade, de pressão e concentração foi usada a aproximação de Reynolds.

De acordo com Anderson *et al* (1984) *apud* BOTELHO & MOREIRA (1991)<sup>18</sup> podemos particularizar a equação geral de transporte respectivamente para a continuidade, quantidade de movimento e massa. As formas conservativas das equações diferenciais correspondentes são:

(i) para a continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u_j + \overline{\rho' u_j'} \right) = 0 \quad (3.42)$$

(ii) para a quantidade de movimento

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho u_i + \overline{\rho' u_i'} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho u_i u_j + u_i \overline{\rho' u_j'} \right) = \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \tau_{ij} - u_j \overline{\rho' u_i'} - \overline{\rho u_i' u_j'} - \overline{\rho' u_i' u_j'} \right) \quad (3.43)$$

onde

$$\tau_{ij} = \mu \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] \quad (3.44)$$

(iii) para massa, onde a evolução de uma grandeza escalar (como a concentração de massa dos gases dissolvidos em questão):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho C) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho C u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( D_{AB} \frac{\partial C}{\partial x_j} - \rho \overline{C' u_j'} \right) + S_\phi \quad (3.45)$$

<sup>18</sup> Anderson, A. A., Tannehill, J. C., and Pletcher, R. H. (1984) - Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. Hemisphere Publishing Corp. New York.

onde  $S_\phi$  é dado por

$$S_\phi = \frac{\partial P}{\partial t} + u_j \frac{\partial P}{\partial x_j} + \overline{u'_j \frac{\partial P'}{\partial x_j}} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (3.46)$$

onde

$C$  é a concentração média do gás na água

$u_i$  é a componente  $i$  da velocidade média

$x_i$  é a dimensão  $i$

$u'_i$  é a componente  $i$  da flutuação de velocidade

$D_{AB}$  é a difusividade molecular

$S_\phi$  é a parcela de fonte e sumidouros.

A barra indica operação média temporal. Nas equações (3.42-3.45) os símbolos  $u_i$ ,  $\tau_{ij}$ ,  $P$  e  $C$  representam as médias temporais também. Porém na equação (3.46)  $u_j$  e  $\rho$  são valores médios instantâneos. Já as flutuações em outras propriedades do fluido como a viscosidade ( $\mu$ ), a difusividade molecular ( $D_{AB}$ ) são usualmente pequenas e foram desprezadas nas equações (3.44-3.45).

Antes que estas equações possam ser usadas na resolução de problemas, devem-se obter expressões convenientes para os produtos médios de duas flutuações. As velocidades e as pressões são quantidades médias temporais e as componentes tensores de tensão são as somas das viscosidades de cisalhamento e tensões de Reynolds (BIRD *et al.*, 1960). Em termos do campo de velocidades, estes produtos são denominados de tensões de Reynolds. A hipótese de Boussinesq (1877), sugeriu que as tensões turbulentas aparentes fossem relacionadas com os gradientes de velocidade através de uma viscosidade turbulenta aparente,  $\nu_t$  (definida como  $\nu_t = \mu_t/\rho$ ) na forma:

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \rho \bar{k} \right) \quad (3.47)$$

onde  $\bar{k}$  é a energia cinética média de turbulência.

Para o fluxo turbulento de massa é feita uma analogia baseada na similaridade entre o transporte de massa e de quantidade de movimento. Na forma da hipótese de Boussinesq, tem-se:

$$-\rho \overline{u_j' C'} = D_t \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad (3.48)$$

onde  $D_t$  é uma difusividade turbulenta aparente.

Podemos argumentar ainda que em situações especiais (águas rasas, por exemplo) o processo de mistura é muito rápido na dimensão vertical,  $z$ , podendo-se considerar uma concentração uniforme nesta dimensão, excluindo-se a camada limite de concentração, junto à superfície. Podemos então utilizar, para a quantificação do fluxo de massa na superfície, as expressões mostradas a seguir:

$$\dot{m} = D_t \left. \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right|_{z=H} \quad (3.49a)$$

$$\dot{m} = K_L (C_S - C(t)) \quad (3.49b)$$

onde  $C_S$  é a concentração de gás na superfície livre. Quando se tratar de dessorção de um gás traçador  $C_S$  é igual a zero e o fluxo torna-se negativo. Quando é absorção de gás,  $C_S > C(t)$  e o fluxo é positivo. Na verdade a equação (3.49a) é a lei de Fick para o caso turbulento. Entretanto, como o perfil de concentração é normalmente desconhecido, a equação (3.49b) é utilizada em princípio, bastando conhecer as condições limites para a concentração. Porém, cria-se uma deficiência com relação às incertezas decorrentes da turbulência, pois todas elas estão comprometidas em  $K_L$ , o coeficiente de transferência de massa, que indica a facilidade ou dificuldade que uma substância tem de ser absorvida ou dessorvida da água.

Considerando que o fluido é incompressível, como a água, onde  $\rho' = 0$  e  $D\rho'/Dt = 0$ , as equações da continuidade e da quantidade de movimento tornam-se:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \tau_{ij} - \rho \overline{u_i' u_j'} \right) \quad (3.51)$$

onde

$$\tau_{ij} - \rho \overline{u_i' u_j'} = (\mu + \mu_t) \left[ \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \rho \bar{k} \right] \quad (3.52)$$

De acordo com BIRD *et al.* (1960) as equações em coordenadas cilíndricas, nas direções  $r$  e  $z$ , tornam-se:

continuidade:

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho W) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho U) = 0 \quad (3.53)$$

a equação de transporte na direção radial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho U) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho UW) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho U U) = -\frac{\partial P}{\partial r} - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho \bar{k}) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{ef} \left( \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{\partial U}{\partial z} \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \mu_{ef} 2 \frac{\partial U}{\partial r} \right) - 2 \mu_{ef} \frac{U}{r^2} \end{aligned} \quad (3.54)$$

a equação de transporte na direção axial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho W) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho W W) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho U W) = -\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r}(\rho \bar{k}) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \mu_{ef} 2 \frac{\partial W}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \mu_{ef} \left( \frac{\partial W}{\partial r} + \frac{\partial U}{\partial z} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.55)$$

onde

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (3.56)$$

é a viscosidade efetiva do escoamento turbulento. A equação de transporte de massa é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \frac{\partial}{\partial z}(WC) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho UC) + \frac{\partial}{\partial z} \left[ (D_{AB} + D_t) \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r (D_{AB} + D_t) \frac{\partial C}{\partial r} \right] = S_T \quad (3.57a)$$

Esta equação pode ser conduzida para uma outra forma mais completa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho C) + \frac{\partial}{\partial z}(WC) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho UC) + \frac{\partial}{\partial z} \left[ (D_{AB} + D_t) \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r (D_{AB} + D_t) \frac{\partial C}{\partial r} \right] = K_i (C_s - C(t)) \quad (3.57b)$$

A dependência de  $K_i$  com as características dos diferentes tipos de escoamentos não é ainda bem compreendida porque os processos de absorção ou dessorção do gás pelo líquido são controlados, principalmente, pela agitação turbulenta. E como já foi visto anteriormente estes fenômenos necessitam de uma formulação mais adequada que permita a quantificação mais imediata de parâmetros a ela relacionados.

Para a determinação dos coeficientes de transferência,  $K_i$ , considerando que não hajam fontes ou sumidouros do gás em questão, além da atmosfera, sem termos advectivos e sem gradientes de concentração no seu interior, a expressão anterior fica:

$$\frac{dC}{dt} = K_L (C_s - C_{(t)}) \quad (3.58)$$

e integrando a equação acima, obtém-se:

$$C = C_s - (C_s - C_0) \exp(-K_L t) \quad (3.59)$$

Assim foram obtidas novamente as equações básicas para a transferência interfacial de gases. De acordo com SCHULZ *et al.* (1991,1992) os resultados temporais apresentados, que mostram o acerto da evolução exponencial, são inúteis para compreender a região de camada-limite de concentração, pois esta é caracterizada por gradientes muito elevados de concentração, os quais foram desprezados nas simplificações. Segundo SCHULZ *et al.* (1991, 1992) devido à essa falta de informações espaciais nos equacionamentos tradicionais, uma série de estudos foi conduzida ao longo deste século.

### 3.18 A NATUREZA DA TURBULÊNCIA E OS MODELOS DE TURBULÊNCIA

LIST *et al.* (1988) discorrem sobre a modelagem turbulenta da superfície da água comentando que uma das maiores controvérsias desenvolvidas na hidráulica e na mecânica dos fluidos em geral está relacionada à questão de quanto estes modelos computacionais realmente representam tais escoamentos. Comenta-se mais uma vez que qualquer modelo computacional pode ser somente uma representação matemática do processo físico que está sendo modelado e que a turbulência é um dos grandes problemas da mecânica dos fluidos que ainda não foi resolvido. As razões disso serão vistas mais adiante. Segundo LIST *et al.* (1988), apesar do incrível desenvolvimento da potência dos computadores nos últimos 20 anos, tal avanço não ocorreu paralelamente com relação ao entendimento dos mecanismos básicos no escoamento de fluidos.

De acordo com LIST *et al.* (1988) a tarefa principal de qualquer modelo turbulento é representar convenientemente as tensões de Reynolds, ou as flutuações nas equações do escoamento médio, de modo que “fechem” essas equações. Hipóteses são introduzidas correlacionando essas tensões com as informações empíricas. Assim, os modelos turbulentos sempre contém funções ou constantes. É importante lembrar que os modelos turbulentos não descrevem os detalhes das flutuações turbulentas, mas somente os efeitos médios desses termos sobre quantidades médias. Isto significa que as correlações turbulentas são assumidas serem caracterizadas por apenas poucos parâmetros. Por razões dimensionais, a escala de velocidade e a escala de comprimento do movimento turbulento têm um papel importante neste tipo de abordagem (LAUNDER e SPALDING, 1974)

Uma vez que os parâmetros que “caracterizam” os escoamentos foram convenientemente escolhidos, o modelador tem ainda duas tarefas: a **primeira** é obter uma relação entre as tensões correlações e esses parâmetros e, **segundo**, obter a distribuição desses parâmetros sobre todo o campo do escoamento.

As dificuldades em abordar a turbulência, de acordo com RODI (1984), surgem do fato de a turbulência ser um movimento turbilhonar, com altos números de Reynolds usualmente prevalescentes, que têm um amplo espectro de tamanhos de vórtices e um correspondente espectro de frequências de flutuação; seu movimento é sempre rotacional e pode ser pensado como um emaranhado de elementos de vórtices cujos vetores podem ser alinhados em todas as direções, sendo altamente não

estacionários ou transientes. Os maiores turbilhões estão associados com flutuações de baixa frequência e são determinados pelas condições de contorno do escoamento, sendo o seu tamanho da mesma ordem de magnitude do domínio do escoamento. Os menores turbilhões estão associados com altas frequências de flutuações e seu tamanho é limitado pela ação das forças viscosas. Desta forma a amplitude do espectro, e da mesma forma, a diferença entre os maiores e menores turbilhões, aumenta com o número de Reynolds. É principalmente o movimento turbulento de grande escala que transporta a quantidade de movimento e a massa (ou calor) e contribui para as correlações  $\overline{u_i u_j}$  e  $\overline{u_i \Phi}$  resultantes do equacionamento da equação de Navier-Stokes, denominadas de tensões de Reynolds. Portanto, é o movimento de grande escala que tem de ser simulado em um modelo turbulento para a determinação de  $\overline{u_i u_j}$  e  $\overline{u_i \Phi}$ .

Os turbilhões são considerados como elementos que se estendem uns sobre os outros. Devido a esse emaranhado a energia é passada dos maiores para os menores turbilhões até as forças viscosas tornarem-se ativas, quando a energia é dissipada. Esse processo é denominado de "cascata de energia".

De acordo com RODI (1984) durante o processo de cascata, no qual a energia é passada aos turbilhões menores, a sensibilidade à direção é diminuída. Quando o número de Reynolds é alto o bastante, a ponto dos movimentos de grande e pequena escala se separarem no espectro de energia, a sensibilidade à direção é perdida e a pequena escala de movimento dissipativo torna-se isotrópica<sup>19,20</sup>. Assim, o movimento de pequena escala é isotrópico, enquanto o de grande escala não é. A isto denomina-se de isotropia local, sendo um importante conceito na modelação da turbulência. Devido a sua interação com o escoamento médio, o movimento turbulento de grande escala depende grandemente das condições de contorno de um problema. O escoamento médio geralmente tem direções preferenciais que são impostas no movimento turbulento de grande escala.

<sup>19</sup> HINZE (1959), define turbulência isotrópica como o mais simples tipo de turbulência. Entretanto, ela é um tipo hipotético de turbulência, porque nenhum escoamento verdadeiro ou real é isotrópico, embora condições possam ser feitas de tal forma que a isotropia seja mais ou menos aproximada.

<sup>20</sup> DAVIES (1972), descreve que em qualquer fluido turbulento existe uma forte tendência para que as médias das flutuações quadradas das três flutuações de velocidade seja uma igual a outra, ou seja, há uma "tendência" para a turbulência isotrópica.

### 3.18.1 CONSIDERAÇÕES SOBRE MODELOS TURBULENTOS

Segundo MARKATOS (1985) *apud* SOUZA F<sup>o</sup> (1995) os métodos computacionais visam em essência simular tanto quanto sejam possíveis os detalhes do movimento ou, quando suficiente, o comportamento do escoamento médio. Os métodos ainda estão em desenvolvimento e questões matemáticas estão ainda sendo abordadas a partir de novos pontos de vista. Como exemplo, podemos citar a estreita ligação entre a "ciência do CAOS<sup>21</sup>", recentemente desenvolvida, e os fenômenos não-lineares da turbulência. Neste caso particular, tanto o conceito físico do CAOS vinculado à não-linearidade, bem como a ferramenta utilizada (voltada para "soluções discretas" e não contínuas) permitiu um avanço significativo no entendimento dos fenômenos turbulentos.

Os itens apresentados a seguir resumem as áreas de interesse para a simulação de escoamentos turbulentos, assim como os desenvolvimentos feitos e aqueles considerados ainda necessários neste campo de atuação:

i) A "simulação em turbulência" é necessária nas mais diferentes áreas, como: Engenharias Química, Mecânica, Hidráulica, Ambiental, Ciências Biomédicas, e outras.

ii) Alguns resultados têm sido alcançados com modelos de duas equações para fenômenos hidrodinâmicos relativamente simples. Trabalhos de rotina de projetos podem ser empreendidos em muitas aplicações práticas em engenharia, graças aos extensos estudos que têm otimizado esses modelos. Isto demonstra que esta forma de abordagem ainda pode ser explorada com fins aplicativos.

iii) Insucessos são ainda comuns para muitas aplicações, particularmente as que envolvem grandes curvaturas, intermitências<sup>22</sup>, grandes influências de flutuações, efeitos de baixos números de Reynolds, rápida compressão ou expansão, grandes turbilhões, e reações químicas cineticamente influenciáveis. Novos conhecimentos conceituais são necessários nessas áreas.

<sup>21</sup> Segundo MOURÃO, R. F. (1997), CAOS é um "Termo usado, em geral, para descrever o comportamento quase imprevisível de alguns sistemas dinâmicos. (...) Um exemplo dessa imprevisibilidade pode ser exemplificado se desejássemos prever a direção das pequenas partículas suspensas em um fluido, cuja a agitação é denominada movimento browniano. (...) O conhecimento do estado de um sistema caótico em determinado tempo não permitirá prever seu estado ulterior. (...) Na realidade, dois movimentos com estado inicial idêntico, muito próximos entre si, podem evoluir de maneira totalmente diferente".

<sup>22</sup> Entretanto, apesar das grandes dificuldades nesta área STAMOU (1991), estudou com certo sucesso problemas de sedimentação em tanques com paredes curvas. KOMORI *et al.* (1988), estudaram problemas de renovação superficial e intermitências na superfície da água em um canal aberto, obtendo bons resultados.

iv) Apesar de alguns dos mais recentes pontos de vista prometerem a descrição de conceitos de algumas das mais importantes consequências físicas de turbulência, eles não estão ainda no seu estágio definitivo de desenvolvimento. De acordo com RODI (1984), os métodos antigos e mais simples podem ser ainda recomendados como ponto de partida para simulações em engenharia. Conseqüentemente, muitos pesquisadores concentram seus esforços em descrever a turbulência a partir dos modelos já desenvolvidos.

Pode-se resumir algumas características da turbulência que permitem vislumbrar sua natureza complexa com base nas observações de diferentes autores. De acordo com TENNEKES e LUMLEY(1972)<sup>23</sup> *apud* SOUZA F<sup>o</sup> (1995):

- i) o escoamento é aleatório, e necessita de tratamento estatístico no estudo desses processos;
- ii) o escoamento apresenta geralmente altos números de Reynolds;
- iii) há a presença de flutuações tridimensionais da vorticidade (escoamento rotacional nas três direções coordenadas);
- iv) as escalas de turbulência são muito maiores que a escala molecular;
- v) a turbulência é uma propriedade do escoamento do fluido e não do fluido propriamente dito;
- vi) todo escoamento é dissipativo. As tensões viscosas transformam continuamente a energia cinética turbulenta em energia interna.

Ao longo dos últimos 30 anos, os engenheiros têm desenvolvido, aplicado e usado os modelos de turbulência para escoamentos superficiais de água. A estrutura desses modelos é complexa, mesmo para os escoamentos mais simples. Embora cada modelo possa ser "feito sob medida" para um mecanismo de transporte específico, é preciso considerar que a turbulência é comum a todos os problemas de escoamento superficiais de água. Todos os modelos devem portanto tentar retratar apropriadamente os efeitos da turbulência no cálculo do campo de velocidade e seus efeitos sobre a distribuição de calor, substâncias dissolvidas tais como o oxigênio, ou substâncias particuladas, como os sedimentos.

Segundo LIST *et al.* (1988), as equações exatas que descrevem cada detalhe das flutuações turbulentas são conhecidas e os procedimentos numéricos estão disponíveis

---

<sup>23</sup> TENNEKES, H., LUMLEY, J. L. (1972)-*A first course in turbulence*, Massachusetts, the MIT Press, Cap. 1.

para resolver estas equações, em princípio. Em uma solução numérica, o campo de escoamento deve ser discretizado por uma malha numérica. Para resolver os movimentos turbulentos de pequena escala, em uma primeira avaliação, seriam necessários  $10^3$  a  $10^9$  pontos na malha para cobrir o domínio de escoamento em três dimensões. Na maioria dos casos, as *flutuações são completamente removidas do equacionamento e são substituídas pela média adequada nas equações governantes*. O modelo deve, então, descrever completamente o efeito da turbulência sobre estas equações do movimento médio.

### 3.18.2 MODELOS DE TURBULÊNCIA DE DUAS EQUAÇÕES

LAUNDER e SPALDING (1974) classificam os modelos de turbulência dividindo-os em dois grupos: os modelos que utilizam a concepção de viscosidade turbulenta e os que não utilizam<sup>24</sup>. A classificação dos modelos é: modelos sem equação de transporte, com uma equação de transporte e com duas equações de transporte. No caso trata-se do transporte da propriedade turbulenta (energia cinética, taxa de dissipação de energia cinética, flutuação de vorticidade). Como no presente trabalho foi usado o modelo de duas equações (modelo padrão  $k-\varepsilon$ ), foram discutidos basicamente os principais aspectos deste modelo.

Os modelos de duas equações levam em conta o transporte de escala de velocidade turbulenta quanto da escala de comprimento. Segundo RODI (1984), os modelos de duas equações são os mais simples que prometem sucesso para escoamentos no qual a escala de comprimento não pode ser descrita empiricamente de uma maneira fácil. Um exemplo são os escoamentos com recirculação. GOSMAN *et. al.* (1969) apresentaram um *Estado da Arte* sobre escoamentos com recirculação, no entanto aplicando apenas o conceito de vorticidade e função de corrente para escoamento bidimensionais, surgindo como um prenúncio dos modelos turbulentos mais modernos para escoamento com recirculação. LAUNDER e SPALDING (1972, 1974) descrevem modelos de turbulência de duas equações, fazendo uma ampla discussão sobre os mesmos.

---

<sup>24</sup> HINZE (1959), aponta as considerações de Kolmogorov : “Em números de Reynolds altos existe uma faixa de altos números de onda onde a turbulência está estatisticamente em equilíbrio e é unicamente determinada por parâmetros de dissipação de energia e viscosidade turbulenta”. Este equilíbrio universal é assim denominado por causa que a turbulência nesta faixa é independente de condições externas e de qualquer faixa na escala de tempo e escala de comprimento efetiva desta turbulência, que somente pode ser resultante do efeito de parâmetros de dissipação e viscosidade turbulenta.

Grande número de escoamentos têm sido reproduzidos com o mesmo grupo de constantes empíricas nos modelos de duas equações, com suficiente precisão para a maioria das finalidades. KHODADADI *et al.* (1990), por exemplo, estudaram os efeitos das constantes turbulentas nos escoamentos circulantes confinados, definindo um número adimensional de recirculação em tubos cilíndricos, combustores e câmaras ciclônicas. Os autores visaram obter mais informações sobre o comportamento do modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ . Entretanto, é importante mencionar que o modelo turbulento não é a única causa para certas discrepâncias reportadas na literatura, mas sim o procedimento de cálculo de escoamentos com recirculação, nos quais a difusão numérica pode ser considerável (MALISKA, 1995 e PATANKAR, 1980), provocados geralmente por erro de truncamento e pelo fato da função de interpolação não ser exata.

Com as técnicas numéricas modernas de cálculo, os modelos de duas equações tornaram-se tão pouco onerosos quanto os de uma equação (LAUNDER e SPALDING, 1972). A sua habilidade para produzir resultados de boa qualidade tem sido demonstrada na literatura, como os escoamentos recirculantes, escoamentos em canais, jatos, paredes, superfícies livres (EIGER *et al.*, 1994) e outros escoamentos bi e tri-dimensionais. O modelo padrão de duas equações,  $k-\varepsilon$ , usando constantes fixas e tanto a viscosidade turbulenta como a difusividade como sendo isotrópicas, têm restrições, mas a sua faixa de aplicabilidade pode ser estendida com modificações relativamente simples.

MYONG *et al.* (1990) fizeram uma abordagem para melhorar o modelo  $k-\varepsilon$  em escoamentos próximos às paredes, considerando duas características de escalas de comprimento para a taxa de dissipação de energia: uma para a região muito próxima à parede e outra remota a ela, as quais foram relacionadas com as escalas de transferência de quantidade de movimento em canais e tubos. Os autores buscaram corrigir o comportamento das principais quantidades turbulentas tais como tensões de Reynolds, energia cinética turbulenta e sua dissipação próximas às paredes, e distribuições de difusividade turbulenta de momento, basicamente para resolver um problema básico: a precisão de previsão das quantidades acima referidas, dentro e fora da região próxima da parede. MINER *et al.* (1991) também fizeram uma abordagem sobre o amortecimento causado pela parede no modelo  $k-\varepsilon$  usando simulações para o escoamento em canais com números de Reynolds moderados, concluindo que melhoras na modelagem das equações de transportes de  $k$  e  $\varepsilon$  podem ser feitas com o

uso de diferentes funções diferentes daquelas referidas por MYONG *et al.* (1990), para os termos de produção de energia.

Segundo LAKSHIMINARAYANA (1986) há uma outra classificação geral de modelos além daquela descrita por LAUNDER e SPALDING (1972,1974): os de viscosidade turbulenta e de tensões de Reynolds sendo o mais simples o de Boussinesq (1877). LAKSHIMINARAYANA (1986) concluiu a partir de sua revisão sobre modelos turbulentos para escoamentos que aqueles de duas equações como o  $k-\varepsilon$ , que usa  $C_\mu$  como um valor constante, não são adequados para previsão de escoamentos complexos tridimensionais. Entretanto, para escoamentos bidimensionais mesmo com separação, curvatura (STAMOU, 1991), ou rotação, o uso de um modelo de duas equações com uma expressão própria de  $C_\mu$  pode ser adequado. YANG *et al.* (1993) lembram mais uma vez que na modelagem turbulenta o modelo  $k-\varepsilon$ , que foi elaborado para escoamentos com altos números de Reynolds é o mais amplamente usado nos cálculos de engenharia. De fato, o modelo  $k-\varepsilon$  utiliza as grandezas que geralmente estão associadas com estudos relacionados às altas agitações. Assim, as melhores reproduções de dados sobre transferência de gases devem estar associados com esta faixa de agitação, que é o caso do presente trabalho.

### 3.18.3 DESENVOLVIMENTO DO MODELO DE DUAS EQUAÇÕES: O MODELO $K-\varepsilon$

De acordo com BOTELHO e MOREIRA (1991), pela analogia com a teoria cinética dos gases, com a qual se pode calcular a viscosidade molecular dos gases com razoável precisão, espera-se poder modelar a viscosidade da turbulência como

$$\mu_t = \rho V_t l \quad (3.60)$$

onde  $V_t$  e  $l$  são a velocidade e a escala de comprimento características da turbulência. O problema evidentemente é encontrar meios de avaliar  $V_t$  e  $l$ . Assim, Prandtl (1925), estabeleceu o primeiro modelo algébrico, no qual o comprimento de mistura  $l$  deve ser obtido algebricamente,

$$V_t = l \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \quad (3.61a)$$

sendo  $x$  uma coordenada transversal ao escoamento. Dois pontos fracos existem nesse modelo. O primeiro: não se leva em conta a convecção e a difusão de  $V_t$ . Segundo,  $\mu_t$  se anula onde  $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$ .

Logo depois surgiu o primeiro modelo diferencial, também desenvolvido por Prandtl (1945), sendo que  $V_t$  foi interpretado da seguinte forma:

$$V_t = C_k \left( \bar{k} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.61b)$$

onde é estabelecida uma equação diferencial para o transporte de energia cinética de turbulência, para um fluido incompressível. Segundo Anderson *et al.* (1984) *apud* BOTELHO e MOREIRA (1991) esta equação é descrita na forma:

$$\rho \left( \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + u_j \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right) = \frac{1}{2} \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{Pr_k} \right) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] - \frac{C_D \rho \bar{k}^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (3.62)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo da equação é a taxa de incremento de  $\bar{k}$ , os demais termos do segundo membro, respectivamente, são a taxa de geração de  $\bar{k}$ , a taxa de difusão de  $\bar{k}$  e a taxa de dissipação de  $\bar{k}$ .  $Pr_k$  é aproximadamente igual a 1, denominado de número de Prandtl para a energia cinética turbulenta e  $C_D = 0,09$ , de acordo com RANADE *et al.* (1989b). Neste modelo de uma equação (diferencial),  $l$  deve ser determinado por modelos algébricos.

Kolmogorov (1942) *apud* BOTELHO e MOREIRA (1991) propôs um modelo de turbulência supondo que a turbulência devia ser descrita por duas quantidades independentes, sendo que a primeira escolhida foi a energia cinética de turbulência,  $\bar{k}$ , e a segunda foi uma frequência característica do movimento turbulento. De acordo com LAUNDER e SPALDING (1972) ambas devem ser determinadas por meio de equações diferenciais. Posteriormente, os parâmetros escolhidos para fechar o modelo de duas equações passaram a ser a energia cinética  $\bar{k}$  e o comprimento de mistura,  $l$ .

De acordo com os autores supra citados, o cálculo de  $l$  através de uma equação diferencial, torna possível modelar escoamentos com recirculação (elípticos) e escoamentos totalmente desenvolvidos em dutos de seção transversal complexa, uma vez que existe uma grande influência da geometria na distribuição dos comprimentos de mistura turbulenta.

Apesar de todo o esforço, a escolha da segunda variável foi novamente modificada por causa das dificuldades de representar alguns termos na equação de transporte para  $l$ . Definindo-se  $\varepsilon$  como a taxa de dissipação de energia da turbulência, pela equação (3.61b), a escala de tempo envolvida torna-se

$$\frac{l}{C_D \bar{k}^{\frac{1}{2}}} = \frac{\bar{k}}{\varepsilon} \quad (3.63a)$$

Assim,

$$\varepsilon = \frac{C_D \bar{k}^{\frac{3}{2}}}{l} \quad (3.63b)$$

Escolhendo-se  $\varepsilon$  como o segundo parâmetro no modelo de duas equações, a equação de transporte da taxa de dissipação de energia de turbulência geralmente aceita (ver RODI, 1980) é:

$$\rho \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) = C_1 \frac{\mu_t \varepsilon}{2 \bar{k}} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_t}{Pr_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] - C_2 \frac{\rho \varepsilon^2}{\bar{k}} \quad (3.64)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo da equação é a taxa de incremento de  $\varepsilon$ , os demais termos do segundo membro, respectivamente, são a taxa de geração de  $\varepsilon$ , a taxa de difusão de  $\varepsilon$  e a taxa de dissipação de  $\varepsilon$ .  $Pr_\varepsilon$  é aproximadamente igual a 1,3, denominado de número de Prandtl para a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta,  $C_1 = 1,44$  e  $C_2 = 1,92$ , de acordo com RANADE *et al.* (1989b).

Desta forma, usando as equações (3.60), (3.61b) e (3.63b), obtém-se a viscosidade aparente em termos de  $\bar{k}$  e  $\varepsilon$

$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho \bar{k}^2}{\varepsilon} \quad (3.65)$$

onde  $C_\mu = C_D C_k = 0,09$ .

As equações (3.62) e (3.64) são válidas somente em regiões de regime totalmente turbulento, distante de efeitos de amortecimento de paredes ou superfícies livres. Portanto, para resolvê-las numericamente é preciso estabelecer as condições internas de contorno.

A definição da equações 3.65 é utilizada em conjunto com as equações diferenciais de  $k$  e de  $\varepsilon$ . As três equações podem ser resolvidas, simultaneamente, utilizando procedimentos numéricos. O modelo  $k$ - $\varepsilon$  é um modelo semi-empírico que se baseia em análises dimensionais e possui coeficientes que devem ser determinados a partir da experimentação.

O modelo  $k$ - $\varepsilon$  já representado anteriormente é normalmente escrito, nos textos que tratam da modelação numérica, na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + G - \rho \varepsilon \quad (3.66)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + (C_1 G - C_2 \rho \varepsilon) \frac{\varepsilon}{k} \quad (3.67)$$

por conveniência  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são, respectivamente, o número de Prandtl para  $k$  e  $\varepsilon$ ,  $\mu_t$  é a viscosidade turbulenta,  $G$  é a taxa de geração de turbulência,  $C_1$  e  $C_2$  são constantes empíricas no modelo. Observa-se, portanto, a semelhança formal existente entre as equações 3.66 e 3.67.

De acordo com LAUNDER e SPALDING (1972, 1974) e MINKOWYCZ (1988) o modelo  $k$ - $\varepsilon$  descrito acima que contém cinco constantes  $C_\mu$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  e teve os valores destas constantes avaliados a partir de experimentos substancialmente diferentes. Os valores usuais são:

$$C_\mu = 0,09, \quad C_1 = 1,44, \quad C_2 = 1,92, \quad \sigma_k = 1,0 \quad \text{e} \quad \sigma_\varepsilon = 1,3$$

### 3.19 MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS AOS ESCOAMENTOS ELÍPTICOS COM RECIRCULAÇÃO

Nesta seção é apresentada uma descrição da evolução dos métodos numéricos capazes de prever escoamentos com características elípticas. De acordo com MALISKA (1995) os problemas elípticos são aqueles nos quais as informações físicas se transmitem em todas as direções coordenadas. Assim, os efeitos de pressão e difusivos são elípticos e requerem o estabelecimento de condições de contorno em ambos os sentidos da coordenada em questão.

Também são apresentados os principais estudos relacionados com o desenvolvimento das funções de interpolação e uma avaliação dos esquemas de discretização para prever escoamentos elípticos. Dentre os estudos escolhidos e relacionados com recirculação são ressaltadas aqui as *funções de interpolação do tipo exponencial e de potência* que, de acordo com o que foi discutido em RANADE *et al.* (1989b), são as mais eficientes. São também descritos os principais aspectos desses métodos, desde os primeiros estudos até os dias atuais, sem perder de vista a aplicação em sistemas de tanques de mistura.

O primeiro estudo sistematizado sobre recirculação em escoamentos turbulentos e laminares de fluidos talvez tenha sido desenvolvido por GOSMAN *et al.* (1969), os quais descreveram alguns algoritmos para esses escoamentos, na forma mais geral possível, no entanto, aplicando o conceito de vorticidade e função de corrente para os casos bi-dimensionais. Os referidos autores discutiram sobre os principais aspectos da recirculação com aplicação em engenharia, em diversas situações, mostrando o desenvolvimento e elaboração de programas para simular e resolver alguns problemas clássicos da mecânica dos fluidos, os quais requeriam que as propriedades do escoamento dependessem apenas das variáveis espaciais.

Entretanto, GOSMAN *et al.* (1969) não conheciam os métodos atualmente conhecidos para o acoplamento de pressão-velocidade. Por isso, talvez, tenham utilizado o conceito de vorticidade e função de corrente. Até aquele momento, os problemas elípticos eram considerados muito mais embaraçosos para resolver do que os denominados parabólicos. Além disso, até aquele presente momento as equações elípticas que a engenharia costumava resolver eram somente aquelas de condução de calor em estado estacionário em sólidos.

ZERBINI (1992) fez um levantamento da literatura sobre recirculação, com aplicação a sistemas confinados (câmaras ciclônicas), apontando GOSMAN *et al.* (1969) como referência para vários trabalhos como os de CROWE *et al.* (1974)<sup>25</sup>, KUBO *et al.* (1975)<sup>26</sup>, BUSNAINA *et al.* (1981)<sup>27</sup> *apud* ZERBINI (1992).

Partindo-se cronologicamente dos estudos específicos em tanques de mistura, fermentadores, aeradores, etc. (seções 3.15 e 3.16) desde BATES *et al.* (1963), CUTTER (1966) até SMITH (1997), verificou-se que os principais estudos com simulação numérica em tanques de mistura começaram efetivamente com HARVEY e GREAVES (1982a,b), sendo que houve uma evolução considerável nos trabalhos de CHAPPLE e KRESTA (1994), RANADE *et al.* (1989a,b, 1992a,b e 1996b), RANADE *et al.* (1997b), bem como em SMITH (1997), entre outros.

HARVEY e GREAVES (1982a,b) basearam-se nos dados experimentais de GÜNKEL *et al.* (1975), e aparentemente desenvolveram eles próprios os experimentos e o programa para as simulações. RANADE *et al.* (1989a) também executaram medidas turbulentas em tanques de mistura, porém não desenvolveram o programa computacional para as suas simulações (RANADE *et al.* (1989b), nas quais utilizaram um programa comercial denominado FIAT (*FLOW IN AGITED TANKS*)).

### 3.19.1 CONVERGÊNCIA E PRECISÃO DOS ESQUEMAS DE DIFERENÇAS FINITAS PARA PROBLEMAS DE CONDUÇÃO E CONVECÇÃO BI-DIMENSIONAIS.

Nesta seção é feita uma descrição dos diversos esquemas que usam diferentes funções de interpolação, as quais surgem das equações de transporte diferenciais aproximadas. Como *a priori* não se conhece a forma funcional da variação da variável em questão ( $U$ ,  $W$ ,  $k$ ,  $\varepsilon$ ,  $C$ , etc), necessita-se portanto de uma função de interpolação que descreva essa variação no interior do volume de controle. MALISKA (1995), descreve que, sem exagero, o estabelecimento da função de interpolação é a parte fundamental na concepção de um método numérico.

Entretanto, antes de iniciar a descrição das discretizações analisadas é conveniente definir alguns termos, de acordo com WROBEL (1989):

<sup>25</sup> CROWE, C.T. *et al.* (1974) - Analysis of the flow field in cyclone separators. *Computers and Fluids*. V. 2, pp. 2634-2649.

<sup>26</sup> KUBO, J. *et al.* (1975) - Numerical calculation of turbulent swirl flow. *J. Fluids Eng. Mech., ASME*. V. 97, pp. 310-315.

<sup>27</sup> BUSNAINA *et al.* (1981) - Numerical simulation of swirling flow in a cyclone chamber. In: *Vortex Flows*. ASME Symp. On Fluid Mechanics of combustion Systems. Boulder, pp. 169-178.

- i) **precisão:** diz-se que uma solução é precisa quando ela difere da solução exata da referida equação a menos de uma precisão pré-estabelecida;
- ii) **consistência:** um esquema é dito consistente quando, ao refinarem-se as aproximações discretizadas, no limite, as mesmas se tornam matematicamente equivalentes às equações diferenciais originais;
- iii) **estabilidade:** é uma propriedade relacionada, basicamente, com o tempo. Quando o método é instável, uma pequena perturbação, tal como um erro de truncamento, tende a crescer na medida em que o processo de cálculo avança no tempo;
- iv) **convergência:** é a condição em relação à qual a solução do esquema aproximado tende para a solução exata da equação diferencial;

SOUZA F<sup>o</sup> (1994) descreve ainda dois termos importantes:

- v) **difusão numérica:** tem efeitos semelhantes aos efeitos da difusão física (molecular e turbulenta), sendo que o fenômeno é causado puramente por efeitos numéricos;
- vi) **dispersão numérica:** tem efeitos similares à dispersão física, como na difusão numérica.

RUNCHAL (1972) é uma das primeiras referências em que se apresenta um estudo da convergência e precisão (acuidade) de esquemas de diferenças finitas para problemas de condução e convecção de calor. Os esquemas estudados foram: esquema de diferenças centrais, esquema *upwind* e um esquema, então recente, proposto por SPALDING (1972). De acordo com RUNCHAL (1972), foi mostrado que o esquema de SPALDING (1972) era a melhor escolha do ponto de vista tanto da precisão quanto da convergência. Toda a problemática girava em torno da falta de garantia da convergência, que nem sempre era obtida, em função dos parâmetros adimensionais, número de Peclet e número de Reynolds. O melhor esquema foi posteriormente denominado de esquema híbrido.

Seguindo o raciocínio de RUNCHAL (1972), SPALDING (1972) mostrou que o esquema *upwind* da formulação das expressões diferenciais, em problemas envolvendo o transporte simultâneo de condução e convecção, é superior ao esquema de diferenças centrais, quando o número de Peclet local dentro de uma malha é alto.

A principal contribuição de SPALDIND (1972) talvez tenha sido aquela de sugerir que as melhores analogias de diferenças finitas eram aquelas que se aproximavam das expressões diferenciais como um todo, e que uma solução exata simples (isto é, unidimensional), forma uma útil, legítima e independente fonte dessas formulações algébricas ideais. O referido autor enuncia ainda que existem muitos modos nos quais equações algébricas podem ser construídas para simular o comportamento das equações diferenciais parciais. Entretanto, alguns métodos são melhores do que outros em precisão na simulação, conveniência de uso e tendência para promover a convergência dentro do procedimento iterativo.

Os esquemas de diferenças centrais e o *upwind* são aqui discutidos juntamente com os exponenciais com o objetivo de colocar lado a lado os esquemas unidimensionais mais importantes.

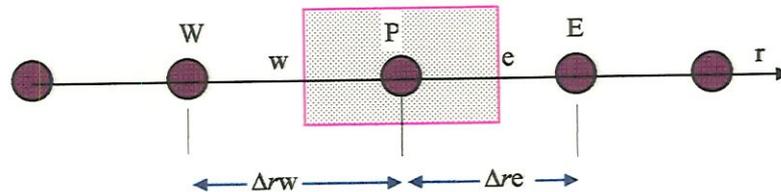
### 3.19.2 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÕES UNIDIMENSIONAIS

Para desenvolver esta seção considera-se a equação de transferência unidimensional 3.68a, com parcelas advectivas e difusivas. Nesta equação,  $J_i$ , é o fluxo da grandeza  $\Phi$ , na direção  $i$ . A primeira parcela do segundo membro, que envolve a velocidade  $U_i$ , na direção  $i$ , é a parcela advectiva, enquanto que a segunda parcela é difusiva.

$$J_i = \rho U_i \Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \quad (3.68a)$$

$\rho$  é a massa específica do fluido e  $\Gamma$  é o coeficiente de transferência em estudo (viscosidade, condutividade térmica, difusividade, tanto turbulenta quanto molecular, conforme o caso). Para efetuar o processo de discretização, considera-se o eixo  $x_i$ , sobre o qual diferentes pontos são escolhidos. Normalmente estes pontos correspondem àqueles nos quais se deseja conhecer o valor da função  $\Phi$ . A figura 3.4 ilustra o comentado. Nesta figura o eixo  $x_i$ , foi denotado por  $r$ . O ponto P é onde centramos a nossa atenção momentânea. O ponto a esquerda recebe a notação cardinal de oeste (WEST, inglês, recebendo como símbolo a letra W). O ponto a direita recebe a notação cardinal de leste (EAST, em inglês, recebendo como símbolo a letra E.)

Nota-se que definiu-se uma região hachurada em torno do ponto P. Esta região é o volume de controle sobre o qual quantificamos o problema. Evidentemente o volume de controle é, de fato, uma “linha de controle”, já que o problema é unidimensional. Desta forma, à esquerda ele é limitado pela parede w (ou pelo ponto w), enquanto à direita ele é limitado pela parede ”e” (ou pelo ponto “e”).



**Figura 3.4:** Discretização Unidimensional. ● são os denominados pontos nodais.

$\Delta r_w$  e  $\Delta r_e$  são as distâncias entre o ponto P e seus vizinhos à esquerda e à direita, respectivamente. Se a malha apresentar espaçamento constante ambos serão idênticos.

Considerando que não possa haver acumulação da grandeza  $\Phi$  no ponto P, tem-se que  $J_i = 0$  e que, em termos dos pontos definidos na figura 3.4, a equação 3.68b pode ser representada como:

$$\rho U \Phi \Big|_e - \rho U \Phi \Big|_w = \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r_e} - \Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial r_w} \quad (3.68b)$$

$U$  é a velocidade na direção  $r$  (radial). Note que se trabalhou nas “superfícies” do volume de controle (pontos  $e$  e  $w$ ) que envolvem o ponto P.

Uma definição conveniente de  $\Phi$ , adotando uma função genérica para avaliar  $\Phi$  nos diferentes pontos marcados sobre  $r$  (denominados de pontos nodais), é necessária para dar prosseguimento ao desenvolvimento da discretização.

Diferentes funções de interpolação geram aproximações diferentes, que produzem soluções diferentes para a mesma equação diferencial, enquanto a malha não for suficientemente refinada (RUNCHAL, 1972; SPALDING, 1972; PATANKAR, 1980; MALISKA, 1995).

### 3.19.3 DIFERENÇAS CENTRAIS

Esse esquema usa uma interpolação linear. Considerando a figura 3.4 acima, em uma situação na qual as faces do volume de controle estejam situadas no meio da distância entre os pontos nodais (PATANKAR, 1980), temos:

$$\Phi_e = \frac{\Phi_E + \Phi_P}{2} \quad ; \quad \Phi_w = \frac{\Phi_W + \Phi_P}{2} \quad (3.69)$$

Conseqüentemente, também podemos aproximar as derivadas como:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_e = \frac{\Phi_E - \Phi_P}{\Delta r_e} \quad ; \quad \left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_w = \frac{\Phi_P - \Phi_W}{\Delta r_w} \quad (3.70)$$

Substituindo as equações 3.69 e 3.70 em 3.68b, considerando um campo de velocidade uniforme, obtemos a equação:

$$\rho U \frac{\Phi_E - \Phi_W}{2 \Delta r} = \Gamma_\phi \frac{\Phi_E + \Phi_W - 2\Phi_P}{\Delta r^2} \quad (3.71)$$

que após um rearranjo transforma-se em

$$A_P \Phi_P = A_E \Phi_E + A_W \Phi_W \quad (3.72)$$

sendo que

$$A_P = \frac{2\Gamma_\phi}{\Delta r^2} \quad ; \quad A_E = -\frac{\rho U}{2\Delta r} + \frac{2\Gamma_\phi}{\Delta r^2} \quad ; \quad A_W = \frac{\rho U}{2\Delta r} + \frac{2\Gamma_\phi}{\Delta r^2} \quad (3.73)$$

Para tornar o arranjo mais compacto, define-se dois símbolos  $F$  e  $D$ , como segue:

$$F \equiv \rho U, \quad D \equiv \frac{\Gamma_\phi}{\delta r} \quad (3.74)$$

Ambos têm as mesmas dimensões:  $F$  indica a convecção (ou o fluxo do escoamento), enquanto  $D$  é a difusão da condutância. PATANKAR (1980), chama a atenção para o fato de  $D$  ser sempre positivo, enquanto  $F$  pode assumir valores tanto positivos quanto negativos, dependendo da direção do escoamento do fluido.

Considerando que a velocidade  $U$  é positiva, a seguinte relação deve ser satisfeita, para que o coeficiente  $A_E$  seja positivo:

$$\frac{\rho U}{2 \Delta r} \leq 2 \quad (3.75)$$

A expressão do membro esquerdo da inequação 3.75 é o número de Reynolds da célula. Para a equação da energia vale talvez mencionar que o número de Reynolds será substituído pelo número de Peclet da célula.

#### 3.19.4 ESQUEMA *UPWIND*

No intuito de evitar o surgimento de coeficientes negativos e as oscilações numéricas já discutidas, usa-se o esquema *upwind*. As funções de interpolação têm as seguintes formas:

$$\Phi_w = \Phi_W \quad ; \quad \Phi_e = \Phi_E \quad ; \quad U > 0 \quad (3.76)$$

$$\Phi_w = \Phi_P \quad ; \quad \Phi_e = \Phi_E \quad ; \quad U < 0 \quad (3.77)$$

resultando nos mesmos coeficientes dados pela equação 3.73, para  $U$  positivo e negativo. De acordo com MALISKA (1995), o esquema *upwind* tem uma relação direta com o termo parabólico, uma vez que o valor da função na interface é igual ao valor da função no volume a montante (cálculo em marcha a partir de um valor anterior conhecido).

#### 3.19.5 A SOLUÇÃO EXATA (ESQUEMA EXPONENCIAL)

Para descrever a solução exata SPALDING (1972) originalmente considerou a transferência de calor unidimensional em estado estacionário, sem fontes internas de calor, a partir da equação diferencial governante da temperatura  $T$  com a distância  $r$ :

$$c_p G \frac{dT}{dr} - \lambda \frac{d^2 T}{dr^2} = 0 \quad (3.78)$$

onde  $c_p$  é o calor específico à pressão constante,  $G$  é a taxa de escoamento de massa da substância por unidade de área da seção reta na direção positiva de  $r$ , e  $\lambda$  é a

condutividade térmica do meio. Para enfatizar suas características principais, SPALDING (1972), reescreveu a equação acima na forma:

$$P_e \frac{dT}{d\xi} - \frac{d^2T}{d\xi^2} = 0 \quad (3.79)$$

onde  $P_e$  é o número de Peclet, ou seja, é uma quantidade adimensional ( $c_p G L / \lambda$ ),  $L$  é o comprimento do domínio de interesse e  $T$  é a temperatura adimensionalizada (cuja variação está entre os valores 0 e 1);  $\xi$  é a razão  $r/L$ . Observa-se que  $P_e$  controla a importância relativa dos termos de primeira e segunda ordem (ver equação 3.79).

Considerando que as temperaturas dos contornos do domínio uni-dimensional são zero e um, respectivamente, então as condições de contorno são:

$$\xi = 0 \quad ; \quad T = 0 \quad (3.80)$$

$$\xi = 1 \quad ; \quad T = 1 \quad (3.81)$$

Busca-se obter a solução da equação com essas condições de contorno, por meio de procedimentos de discretização. Neste caso, entretanto, tem-se uma solução exata que pode servir para os estudos iniciais acerca das funções de interpolação.

SPALDING (1972) parte da solução geral para o problema da equação 3.80 resultando em:

$$T = A e^{P_e \xi} + B \quad (3.82)$$

onde  $A$  e  $B$  são constantes arbitrárias. A inserção das condições de contorno na equação 3.78 leva a:

$$\xi = 0 \quad ; \quad 0 = A + B \quad (3.83)$$

$$\xi = 1 \quad ; \quad 1 = A e^{P_e} + B \quad (3.84)$$

então

$$A = \frac{1}{e^{P_e} - 1} \quad (3.85)$$

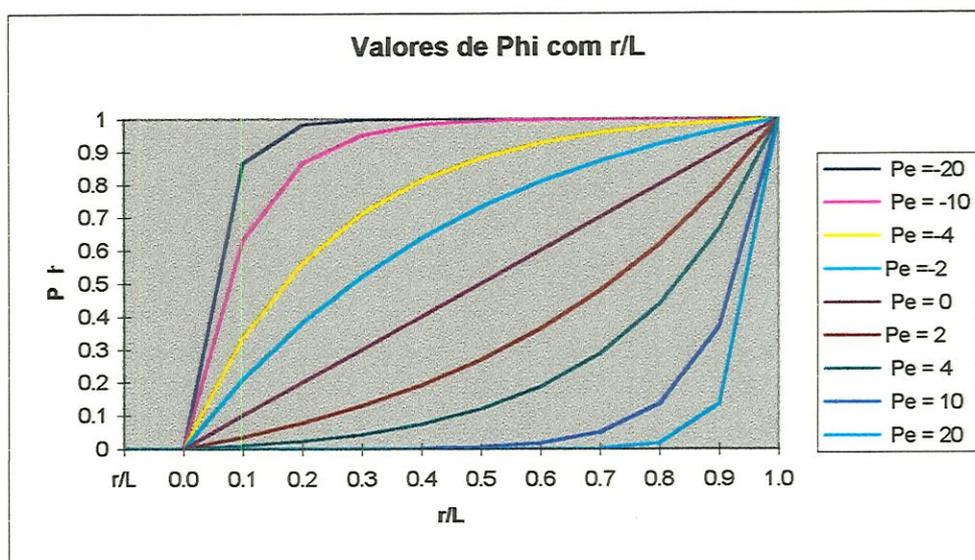
$$B = -\frac{1}{e^{P_e} - 1} \quad (3.86)$$

e portanto a solução requerida é:

$$T = (e^{Pe \cdot \xi} - 1) / (e^{Pe} - 1) \quad (3.87)$$

É óbvio que se o esquema exponencial é usado como a própria função de interpolação, a solução numérica obtida será a exata, independentemente do número de malhas empregado.

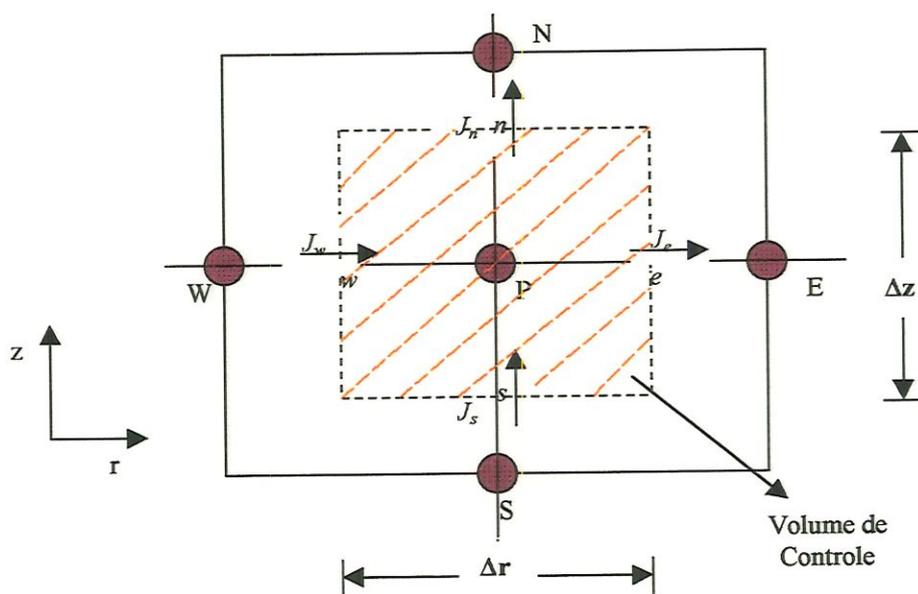
Na figura abaixo é mostrado a variação das curvas de  $\Phi$  (Phi) com  $\xi = r/L$  para 9 valores de  $Pe$ .



**Figura 3.5:** Curvas obtidas da equação 3.87, para os vários valores de  $Pe$ .

### 3.19.6 A REPRESENTAÇÃO DO FLUXO TOTAL

Voltando à representação anteriormente adotada de avaliar a evolução da função  $\Phi$ , porém considerando o esquema bi-dimensional da figura 3.6, algumas considerações podem ser tecidas para cada face do volume de controle indicado.



**Figura 3.6:** Um volume de controle típico com malha deslocada para o Caso Bi-dimensional.

Na face  $e$ , entre os pontos P e E, pode-se admitir o uso do perfil exato. Esta forma de abordagem conduz à equação 3.89, que representa a descarga de  $\Phi$  através desta face (descarga = fluxo x área):

$$J_e A_e = F_e \left( \Phi_P + \frac{\Phi_P - \Phi_E}{\exp(Pe_e) - 1} \right) \quad (3.89)$$

O número  $Pe_e$ , é definido envolvendo as grandezas  $\Gamma_e$  e  $\Delta r_e$ , mostradas na figura 3.6.

$$Pe_e = \frac{(\rho U)_e \Delta r_e}{\Gamma_e} = F_e / D_e \quad (3.89)$$

$F_e$  é o fluxo de massa através da face e  $D_e$  é o termo de condução ou da difusão. A taxa de escoamento  $F_e$  é definida como:

$$F_e = (\rho U)_e A_e \quad (3.90)$$

Se o coeficiente de difusão  $\Gamma_\Phi$  é uniforme em todo o volume de controle, a expressão apropriada para  $D_e$  é:

$$D_e = A_e \left[ \frac{(\Delta r)_{e^-}}{\Gamma_P^\Phi} + \frac{(\Delta r)_{e^+}}{\Gamma_P^\Phi} \right] \quad (3.91)$$

A razão para definir  $D_e$  desta maneira é discutida na referência PATANKAR (1980). Observa-se, no entanto, que o fluxo  $F_e$  não depende da localização das interfaces entre os pontos P e E.

Finalmente substituindo as equações 3.88-91 em 3.68a,b (ou 3.69), tem-se, em regime permanente:

$$F_e \left( \Phi_P + \frac{\Phi_P - \Phi_E}{\exp(Pe_e) - 1} \right) - F_w \left( \Phi_w + \frac{\Phi_w - \Phi_P}{\exp(Pe_w) - 1} \right) = 0 \quad (3.92)$$

a qual pode ser escrita na forma padrão

$$a_P \Phi_P = a_E \Phi_E + a_W \Phi_W \quad (3.93)$$

onde

$$a_e = \frac{F_e}{e^{(F_e/D_e)} - 1} \quad (3.94)$$

$$a_w = \frac{F_w e^{(F_w/D_w)}}{e^{(F_w/D_w)} - 1} \quad (3.95)$$

$$a_P = a_E + a_W + (F_e - F_w) \quad (3.96)$$

PATANKAR (1980) argumenta que o esquema exponencial, quando aplicado a um problema unidimensional para o caso de estado estacionário, garante um resultado exato para qualquer número de Peclet.

O esquema híbrido, apesar de ser um dos pontos de partida para a aproximação da lei exponencial, no presente trabalho, não é apresentado em detalhes. Detalhes sobre o esquema híbrido podem ser encontrados PATANKAR (1980) ou MALISKA (1995).

### 3.19.7 ESQUEMA DA LEI DE POTÊNCIA

O esquema da lei de potência surgiu em decorrência de o esquema exponencial não ser econômico computacionalmente. Desta forma, PATANKAR (1979a) *apud* PATANKAR (1980) sugeriu uma aproximação do esquema exponencial. Embora este seja um pouco mais complicado do que o esquema híbrido, as expressões da lei de potência não são particularmente antieconômicas para computação e fornecem uma boa representação do comportamento exponencial.

Como um exemplo do uso das expressões da lei de potência, a equação do fluxo de  $\Phi$  é representado pelas equações abaixo:

$$J_e A_e = F_e \Phi_p + \{ D_e A(|Pe_e|) + \|-F_e, 0\|\} (\Phi_p - \Phi_e) \quad (3.97)$$

onde

$$A(|Pe|) = \left\| 0, (1 - 0.1|Pe|)^5 \right\| \quad (3.98)$$

O símbolo  $\|a, b\|$  é usado para denotar “o maior de  $a$  e  $b$ ”.  $A(P_e)$  é uma função que depende do esquema adotado. Em particular para a lei de potência esta função é dada pela equação 3.98. O esquema resultante para esta aproximação apresenta um expoente de quinta ordem, fornecendo uma excelente aproximação da solução exata. Uma vantagem adicional deste esquema com relação à solução exata é que a equação exponencial de SPALDING (1972) tem uma singularidade computacional ( $P_e \neq 0$ ) em  $F_e = 0$ , e isso não ocorre na equação 3.98.

### 3.19.8 LINEARIZAÇÃO DO TERMO FONTE

Uma das principais motivações para a linearização do termo fonte é a necessidade da convergência do processo iterativo. Uma vez que a representação das equações de conservação desloca termos importantes para o termo fonte deve-se ter cuidados especiais para que o processo iterativo não divirja. MALISKA (1995) afirma que o termo fonte deve ser levado em conta o mais implicitamente possível, que

significa dizer não mantê-lo constante ao longo do processo iterativo ou passo de tempo.

Como geralmente o termo fonte depende da própria variável  $\Phi$ , nesses casos, leva-se em conta esta dependência na equação de discretização. Uma vez que a equação de discretização resultante permanece "linear" o termo fonte médio é expresso como uma função linear de  $\Phi_P$ . PATANKAR (1980) sugeriu a fórmula geral:

$$\bar{S} = S_C + S_P \Phi_P \quad (3.99)$$

onde  $S_P$  é o coeficiente de  $\Phi_P$  e  $S_C$  é a parte constante de  $\bar{S}$  que não depende explicitamente de  $\Phi_P$ . Se  $S_C$  é uma constante para  $\bar{S}$  então é admitido que  $\Phi_P$  prevalece sobre todo o volume de controle. Os termos fontes para todas as grandezas como  $U$ ,  $W$ ,  $k$  e  $\varepsilon$  estão detalhados tabela 3.6.

**Tabela 3.6:** Parâmetros característicos das equações de transporte. Esquema das funções de transporte e termos fonte para a equação da continuidade e de cada componente, respectivamente: radial ( $U$ ), axial ( $W$ ), termos turbulentos  $k$  e  $\varepsilon$ . Fonte: RANADE *et al.* 1989b e KHALIL *et al.* (1975).

$\Phi$	$\Gamma_\Phi$	$S_\Phi$
1	0	0
$U$	$\mu_{eff}$	$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu_{eff} r \frac{\partial U}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \mu_{eff} r \frac{\partial (v/r)}{\partial r} \right) - \frac{2 \mu_{eff}}{r^2} \frac{\partial v}{\partial \theta} - \frac{2 \mu_{eff} U}{r^2} + \frac{\rho V^2}{r} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial r} \right) - \frac{\partial P}{\partial r}$
$W$	$\mu_{eff}$	$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \mu_{eff} r \frac{\partial U}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( U \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_{eff} \frac{\partial W}{\partial z} \right) - \frac{\partial P}{\partial z}$
$k$	$\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k}$	$G_k - \rho \varepsilon$
$\varepsilon$	$\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon}$	$\frac{\varepsilon}{K} (C_1 G - C_2 \rho \varepsilon)$
$^{28}C$	$D_{AB} + D_t$	$K_L (\Delta r \Delta z) (\bar{C}_S - C_t)$
onde		$G = \mu_t \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial U}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{U}{r} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] + \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta} \right]^2 + \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial z} \right]^2 + \left[ \frac{\partial U}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right]^2 \right\}$

<sup>28</sup> Nessa linha da tabela 3.6 todos estes termos foram incluídos no presente trabalho.

**Tabela 3.7:** Valores de parâmetros do modelo  $k - \varepsilon$ 

PARÂMETRO	VALOR
$C_D$	0.09
$\sigma_k$	1.0
$\sigma_\varepsilon$	1.3
$C_1$	1.44
$C_2$	1.92

**3.19.9 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DA CONTINUIDADE**

Primeiramente as equações relevantes ao problema são apresentadas e posteriormente são discretizadas. A apresentação, na forma genérica já adotada na equação (regime não-permanente), para todas as equações de transporte, é dada por:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_j \Phi - \Gamma_\Phi \frac{\partial\Phi}{\partial x_j}) = S_\Phi \quad (3.100a)$$

onde  $\Phi$  é uma propriedade intensiva,  $\Gamma_\Phi$  e  $S_\Phi$  são, respectivamente, o coeficiente de difusão e o termo fonte. Convertendo a equação 3.100a para o sistema de coordenadas cilíndrico, tem-se a equação 3.16, aqui novamente reescrita para permitir maior proximidade entre a equação e a discussão elaborada sobre a mesma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r U \Phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho V \Phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho W \Phi) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \Gamma_{\Phi, \text{eff}} r \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right) + \dots \\ \dots + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\Gamma_{\Phi, \text{eff}}}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\Phi, \text{eff}} \frac{\partial\Phi}{\partial z} \right) + S_\Phi \end{aligned} \quad (3.100b)$$

sendo que

- $r$  coordenada radial
- $\theta$  coordenada tangencial
- $z$  coordenada axial
- $U$  velocidade média radial
- $V$  velocidade média tangencial
- $W$  velocidade média axial

onde, como já foi mencionado,  $\Gamma_{\phi, \text{eff}}$  denota um coeficiente de troca efetivo, incluindo as contribuições turbulentas e molecular, e  $S_{\phi}$  (ou  $\bar{S}$ ) é o termo fonte denotando a taxa volumétrica de crescimento e decaimento de  $\Phi$ .

Admitindo que o termo fonte  $S_{\phi}$  possa ser linearizado na forma  $S_{\phi} = S_p \Phi + S_c$ , tem-se a equação 3.100c:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r U \Phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho V \Phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho W \Phi) &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \Gamma_{\phi, \text{eff}} r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \dots \\ \dots + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\Gamma_{\phi, \text{eff}}}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\phi, \text{eff}} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + S_p \Phi + S_c \end{aligned} \quad (3.100c)$$

As equações de transferência (3.100a-c) nas três direções coordenadas (axial, radial e tangencial) são obtidas quando  $\Phi$  for igualado a  $W$ ,  $U$  e  $V$  com os seus respectivos termos fontes.

### 3.19.10 EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE CONSERVAÇÃO PARA O VOLUME DE CONTROLE DE UMA MALHA DE DISCRETIZAÇÃO

Para a integração da equação 3.100b e 3.100c sobre o volume de controle de uma malha de discretização é conveniente combinar os fluxos convectivos com os difusivos, conforme a equação 3.68<sup>a</sup>, reescrita aqui por conveniência:

$$J_i = \rho U_i \Phi - \Gamma \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \quad (3.101)$$

e a equação diferencial 3.100c, é escrita agora na forma:

$$\frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} = S_{\phi} \quad (3.102)$$

Para um volume de controle típico já mostrado na figura 3.6 a integração da equação 3.101 sobre o volume de controle, em regime permanente, nas direções radial e axial (bi-dimensional), conduz a:

$$J_e A_e - J_w A_w + J_n A_n - J_s A_s = \bar{S} \Delta V \quad (3.103)$$

onde  $A_i$  ( $i = n,s,e,w$ ) são as áreas das várias faces do volume de controle,  $\Delta V$  é o volume do volume de controle e  $\bar{S}$  é o termo fonte médio do volume de controle. Os fluxos  $J_i$  ( $i = n,s,e,w$ ) são os fluxos totais nas faces dos volumes de controle. O campo de escoamento da equação 3.103 deve evidentemente satisfazer a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho U_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.104)$$

As taxas de escoamento através das faces do volume de controle devem igualmente satisfazer a equação da continuidade discretizada, que integrada no volume e em escoamento incompressível ( $d\rho/dt = 0$ ), conduz a:

$$F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (3.105)$$

onde os  $F_i$  ( $i = n,s,e,w$ ) são os fluxos definidos em cada face da molécula computacional de acordo com na equação 3.103, porém com o termo fonte igual a zero (continuidade).

### 3.19.11 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE FINAL DISCRETIZADA

Quando os fluxos totais e os termos fonte são escritos em termos das expressões desenvolvidas nas seções anteriores, as equações gerais discretizadas bi-dimensionais assumem a forma vetorizada<sup>29</sup> genérica:

$$a_P \Phi_P = a_E \Phi_E - a_W \Phi_W + a_N \Phi_N - a_S \Phi_S + b \quad (3.106)$$

onde

$$a_E = D_e A (|Pe_e|) + \|-F_e, 0\| \quad (3.107)$$

$$a_W = D_w A (|Pe_w|) + \|-F_w, 0\| \quad (3.108)$$

$$a_N = D_n A (|Pe_n|) + \|-F_n, 0\| \quad (3.109)$$

$$a_S = D_s A (|Pe_s|) + \|-F_s, 0\| \quad (3.110)$$

$$b = S_C \Delta V \quad (3.111)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_P \Delta V \quad (3.112)$$

<sup>29</sup> Na forma vetorizada temos: P = (I,J), E = (I,J+1), W = (I,J-1), N = (I+1,J), S = (I-1,J)

A equação 3.106 pode ser escrita na forma compacta:

$$a_p \Phi_p = \sum a_{nb} \Phi_{nb} + b \quad (3.113)$$

onde os subscritos  $nb$  denotam os pontos vizinhos do ponto  $P$  na malha, sendo a somatória efetuada sobre todos os pontos vizinhos.

### 3.19.12 A SUBRELAXAÇÃO E A SOBRELAXAÇÃO

A equação 3.113 pode ser reescrita da seguinte forma (PATANKAR, 1980, MINKOWVYCZ *et al.*, 1988):

$$\Phi_p = \Phi_p^* + \left[ \frac{\sum a_{nb} \Phi_{nb} + b}{a_p} - \Phi_p^* \right] \quad (3.114)$$

onde  $\Phi_p^*$  é o valor de  $\Phi_p$  resultante da iteração anterior. O conteúdo dentro dos colchetes pode ser interpretado como uma mudança em  $\Phi$  que está ocorrendo na presente iteração, isto é, no sentido de atingir o valor final de  $\Phi$ . Caso se deixo reduzir esta mudança, um fator de subrelaxamento  $\omega$  (valor entre 0 e 1) é introduzido resultando em (PATANKAR, 1980):

$$\frac{a_p}{\omega} \Phi_p = \sum a_{nb} \Phi_{nb} + b + (1 - \omega) \frac{a_p}{\alpha} \Phi_p^* \quad (3.115)$$

O valor de  $\omega$  controla fortemente a subrelaxação. Se  $\omega$  é próximo de zero as mudanças são lentas. Quando  $\omega$  é igual a unidade, não há subrelaxação. Porém, se  $\omega$  é maior que a unidade (porém menor que 2), o valor de  $\Phi$  varia mais rapidamente e denomina-se a este método de sobre-relaxação. Este método foi aplicado no presente trabalho. Reduzir ou acelerar a “velocidade de convergência” de  $\Phi$  é uma decisão que está vinculada às possibilidades de oscilação da resposta e à necessidade de diminuir o tempo de cálculo.

### 3.19.13 DISCUSSÕES SOBRE OS ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO - FALSA DIFUSÃO

PATEL *et al.* (1987) discutiram sobre os erros de previsão em escoamentos elípticos com transferência de calor. Os autores compararam o desempenho de onze esquemas numéricos alternativos para descrever os escoamentos. Entretanto, eles obtiveram bons resultados apenas com cinco desses esquemas. Concluíram que uma das principais deficiências das hipóteses de interpolações correntes estão relacionadas com a denominada “falsa difusão”. Para fenômenos multidimensionais, envolvendo duas ou três dimensões, a potência dos computadores existentes atualmente é ainda limitada para o uso de malhas muito finas. Assim, usam-se malhas mais grosseiras, que evidentemente, apresentam problemas na obtenção dos resultados. De acordo com PATEL *et al.* (1987), a falsa difusão existe somente em fenômenos multidimensionais e surge principalmente devido à prática comum de tratar escoamentos através da face da célula de controle como *localmente uni-dimensional*. Percebe-se que o uso de malhas grosseiras implica no uso de uma grande região localmente unidimensional. Pode-se ainda considerar que a falsa difusão será tanto maior quanto maior for a multidimensionalidade do problema envolvido. PATEL *et al.* (1987), resumem alguns aspectos inerentes aos esquemas encontrados na literatura, como mostrados na tabela 3.8.

LESCHZINER (1980) comparou três esquemas diferentes, utilizando diferenças finitas, em escoamentos laminares com recirculação, cada um com diferente formulação para aproximar os termos convectivos. O autor mostrou que o esquema híbrido mais popular (*upwind/central*) pode levar a erros severos devido à difusão artificial se o vetor velocidade é significativamente inclinado com relação à direção da malha numérica, em regiões de altos valores do número de Peclet. Também comentou que nos casos de escoamentos turbulentos, particularmente naqueles não confinados, uma vantagem real pode ser obtida pela adoção de esquemas de interpolações com diferenças “inclinadas” ou interpolações quadráticas.

PATANKAR (1980) argumentou ainda que para resolver este problema seria necessário envolver mais pontos vizinhos na equação de discretização. MALISKA (1995) argumenta que a existência de erros de truncamento (ou seja, solução não-exata) que está ligada diretamente à natureza da função de interpolação usada também colabora no fenômeno observado. A tabela 3.8 mostra algumas características das funções de interpolações usadas na literatura.

**Tabela 3.8:** Discussão sobre a influência dos coeficientes em vários esquemas de discretização. Fonte: PATEL *et al.* (1987).

NÚMERO	ESQUEMA DE DISCRETIZAÇÃO	INFLUÊNCIA NEGATIVA DOS COEFICIENTES GERADOS
1	Diferenças Centradas	Podem ocorrer oscilações, para altos valores de $Pe$ .
2	Upwind	Precisão limitada porque seu erro de discretização é de primeira ordem. Exige refinamento da malha para dar bons resultados.
3	Híbrido	Aparentemente não apresentou problemas, pois apresentou boa estabilidade e precisão, uma vez que os coeficientes gerados eram positivos.
4	Diferença Localmente Exata	Como no esquema acima, aparentemente não apresentou problemas, pois também apresentou boa estabilidade e precisão, por serem positivos os coeficientes gerados.
5	Diferença de Potência	Não apresentou problemas, pois também apresentou boa estabilidade e precisão, por serem positivos os coeficientes gerados
6	Diferença Quadrática a Montante	Pode apresentar problemas com relação a geração de coeficientes negativos. Ocorre instabilidades. Problemas de perda de generalidades quando se pretende sanar tal problema.
7	Extensão da Diferença Quadrática a Montante	Pode apresentar coeficientes positivos nos termos de convecção, porém alguns termos fonte induzem o surgimento de coeficientes negativos.
8	Versão Revisada das Diferenças Quadráticas a Montante	Garante sempre coeficientes positivos, pela introdução de um termo fonte linear, porém estes dependem das iterações prévias.
9	SKEW	Os coeficientes de ponto da malha $A_E$ , $A_W$ , $A_N$ , $A_S$ , podem tornar-se negativos enquanto que os coeficientes $A_{SW}$ , $A_{SE}$ , etc continuam sendo positivos, causando instabilidades.
10	Diferença Residual	Apresenta problemas similares ao do Diferenças Centradas.
11	Novo UPSTREAM	A falsa difusão é reduzida ou virtualmente eliminada.

### 3.19.14 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE PROBLEMAS EM ESCOAMENTO DE FLUIDO INCOMPRESSÍVEL - TRATAMENTO DO ACOPLAMENTO DE PRESSÃO-VELOCIDADE

Talvez o primeiro trabalho relevante que buscou uma modelagem em escoamentos viscosos incompressíveis com superfície livre, em regime não-permanente, tenha sido aquele de HARLOW e WELCH (1965), utilizando como variáveis dependentes a própria velocidade e a pressão, ao invés da tradicional (na época, GOSMAN *et al.*, 1969) vorticidade e função de corrente, uma vez que as primeiras tinham uma aplicação mais “natural” e também havia uma tendência momentânea para adotar essas variáveis. O estudo de HARLOW e WELCH (1965), a partir desse momento, foi referência para muitos outros trabalhos, já mencionados neste texto. Avançando na forma de modelar numericamente os escoamentos, LILLEY (1976), estudou uma técnica que pode ser considerada como primitiva para o acoplamento pressão-velocidade para escoamentos com recirculação, utilizando o modelo turbulência  $k-\varepsilon$ , em escoamentos compressíveis aplicados em combustão e reação química.

Posteriormente RAITBHY e SCHNEIDER (1979) estudaram modos de superar as dificuldades de acoplamento nos escoamentos incompressíveis, as quais eram a causa principal das lentas convergências das técnicas iterativas anteriores. O problema do acoplamento pressão-velocidade entre a equação de momento e a conservação da massa foi estudado por vários métodos, que foram comparados entre si.

RAITBHY e SCHNEIDER (1979) mencionam que em escoamentos essencialmente modelados por equações parabólicas o melhor método de acoplamento da equação de momento de massa foi aquele desenvolvido por PATANKAR e SPALDING (1972), o qual foi o mais amplamente utilizado para tais problemas, denominado método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*). Os autores sugeriram também uma melhora para o método SIMPLE para escoamentos elípticos e finalmente fizeram uma avaliação de como em cada caso a taxa de convergência e a estabilidade foram afetadas.

PATANKAR (1980) sugeriu também algumas modificações para melhorar o problema de acoplamento pressão-velocidade, desenvolvendo o método SIMPLER (SIMPLE-Revisado). Esse método apresenta algumas vantagens com relação ao SIMPLE, o qual consiste em resolver a equação de pressão para obter o campo de pressão e resolver a equação de correção de pressão somente para corrigir as velocidades. Lembramos novamente que nos estudos de RANADE *et al.* (1989b), o método SIMPLER



foi o mais eficiente e, portanto, preferido para resolver o problema de escoamento em tanques de mistura.

VAN DORMAAL e RAITHBY (1984) estudaram as variações do método SIMPLE de PATANKAR e SPALDING (1972) e compararam o desempenho dos métodos SIMPLE, SIMPLER e SIMPLEC (SIMPLE-Consistente). Este último foi desenvolvido por Van DORMAAL e RAITHBY (1984) para o estudo específico de dois problemas de escoamento com recirculação. Os autores buscaram alternativas recomendando o método SIMPLEC, o qual remove a necessidade do parâmetro de relaxação  $\omega$  (seção 3.19.12). A discussão gira em torno deste parâmetro, dependendo da ordem de grandeza do termo fonte, pode conduzir ao uso do SIMPLE ou do SIMPLEC.

Quando VAN DORMAAL e RAITHBY (1984) comparam os métodos nos problemas de recirculação (laminar), concluíram que os experimentos numéricos foram sensíveis à diferença dos métodos. Foi demonstrado que o SIMPLER e o SIMPLEC foram substancialmente mais econômicos do que o SIMPLE, e que o SIMPLEC é menos dispendioso do que o SIMPLER para os problemas resolvidos. Apesar das discussões sobre a eficiência desses métodos há atualmente muitos autores que utilizam ainda o método SIMPLE, como ARMFELD (1991), o qual estudou convecção natural usando as soluções das Equações de Navier-Stokes (cavidades retangulares) com malhas deslocadas, demonstrando sua eficiência para esses casos.

LAI e YEN (1993) também investigaram as equações hidrodinâmicas de um escoamento com superfície livre, usando um modelo multi-camada, geralmente usado para simular escoamento em canais abertos com malha deslocada e volumes finitos, com o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ . Os autores fizeram uso de um esquema parecido com o de RHIE e CHOW (sistemas fechados), *apud* ARMFELD (1991), que incorporaram o procedimento SIMPLE para simular escoamento com superfície livre.

McGUIRK *et al.* (1993) estudaram o escoamento sobre um obstáculo em sistema de diluição de um combustor de turbina a gás. Discutiram também os métodos SIMPLE, SIMPLER, SIMPLEC, e ainda dois métodos alternativos PISO e AVI, demonstrando que o SIMPLE foi menos eficiente do que todos os outros. As vantagens dos algoritmos PISO e AVI, com relação ao SIMPLE entretanto, não são suficientes para recomendar a alteração dos presentes algoritmos computacionais já incorporados. Na tabela 3.9, são mostrados exemplos dos coeficientes de difusividade de pressão  $\Gamma_p$  par os trabalhos de McGUIRK *et al.* (1993).

**Tabela 3.9:** Coeficiente de Difusividade para a Pressão  $\Gamma_p$ . Fonte McGUIRK *et al.* (1993).

ALGORITMO	ESTADO ESTACIONÁRIO	ESTADO NÃO-ESTACIONÁRIO
SIMPLE SIMPLER PISO	$\frac{\alpha_{U,V} a}{\sum_{nb} A_{nb}^{U_P} + S_P^{U_P}}$	$\frac{a}{\sum_{nb} A_{nb}^{U_P} + S_P^{U_P} + \rho \frac{\Delta V}{\Delta t}}$
SIMPLEC	$\frac{\alpha_{U,V} a}{(1 - \alpha_{U,V}) \sum_{nb} A_{nb}^{U_P} + S_P^{U_P}}$	$\frac{a}{\rho \frac{\Delta V}{\Delta t} + S_P^{U_P}}$
AVI	-	$\frac{a \Delta t}{\rho \Delta V}$

Os estudos ainda não são conclusivos quanto à aplicabilidade incondicional dos diferentes esquemas. Entretanto, os problemas devem ser resolvidos, o que exige que se adote um esquema, preferencialmente fundamentado em experiências anteriores, para obter uma avaliação da possível solução dos mesmos.

### 4.1. MÉTODO DE VOLUMES FINITOS (MVF) E FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DAS EQUAÇÕES DE TRANSPORTE PARA TANQUES DE MISTURA

O Método dos Volumes Finitos (MVF) utilizado para este trabalho é um dos vários métodos de discretização das equações diferenciais que podem ser utilizados com sucesso para descrever os fenômenos de transporte relevantes na mecânica dos fluidos. O MVF tem se estabelecido para modelar escoamento turbulento de fluidos. As vantagens da utilização do MVF são apresentadas por MALISKA (1995) e são resumidamente descritas a seguir:

Primeira, as equações aproximadas são obtidas por meio de balanços de conservação da propriedade em questão (massa, calor, quantidade de movimento, etc) no interior do próprio volume elementar (a discretização é conservativa). O MVF, ao criar suas equações aproximadas, realiza um balanço da propriedade no próprio volume elementar, para qualquer tamanho de malha e todos os princípios de conservação podem ser verificados em malhas até mesmo grosseiras, enquanto que com outros métodos só é possível com malhas relativamente refinadas. Segunda, a observação de aspectos físicos de cada termo da equação diferencial permite que métodos mais robustos sejam desenvolvidos. Terceira, a possibilidade de associar a interpretação física com a matemática influenciou consideravelmente para que os estudiosos, principalmente os envolvidos com Métodos de Diferenças Finitas (MDF), começassem a utilizar o MVF. Quarta, a sua implementação é mais simples, exige menos memória de computação e apresenta maior velocidade de convergência que outros métodos, como por exemplo, o método dos Elementos Finitos (Chabart e Violet (1991) *apud* ZERBINI (1992)). Quinta, a depuração do programa computacional também fica mais fácil.

### 4.2 AS EQUAÇÕES DIFERENCIAIS - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

De acordo com MINKOWVYCZ *et al.* (1988), todas as situações práticas envolvendo o escoamento de fluido, transferência de massa, turbulência e fenômenos relacionados são governadas pelos princípios de conservação de massa, momento, energia, substâncias químicas, etc. Esses princípios são expressos na forma de

equações diferenciais que, como já foi dito, possuem uma forma comum. O reconhecimento desta forma comum representa uma das vantagens para explorar a construção de um procedimento numérico.

Neste estudo considerou-se o escoamento estacionário turbulento bi-dimensional (*não serão consideradas as taxas de variações tangenciais porque o equipamento simulado gera escoamentos essencialmente axiais*), governado por um conjunto de equações diferenciais parciais elípticas, que podem ser escritas para um campo escalar geral  $\Phi$ , na forma da equação 3.100b aqui reescrita:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\Phi)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho r U \Phi) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}(\rho V \Phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho W \Phi) &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \Gamma_{\phi, \text{eff}} r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \dots \\ \dots + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\Gamma_{\phi, \text{eff}}}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\phi, \text{eff}} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) + S_p \Phi + S_c \end{aligned} \quad (4.1)$$

sendo que

$r$	coordenada radial
$\theta$	coordenada tangencial
$z$	coordenada axial
$U$	velocidade média radial
$V$	velocidade média tangencial
$W$	velocidade média axial

onde  $\Gamma_{\phi, \text{eff}}$  denota um coeficiente de troca turbulento efetivo, incluindo a contribuição molecular, e  $S_{\phi}$  denota a taxa volumétrica de crescimento e decaimento em  $\Phi$ .  $\Phi$  é uma propriedade intensiva (escalar genérico),  $\Gamma^{\Phi}$  e  $S_{\Phi}$  são, respectivamente, o coeficiente de difusão e o termo fonte de  $\Phi$ . (RANADE *et al.* 1989b). Admitindo que o termo fonte  $S_{\phi}$  possa ser linearizado na forma,  $S_{\phi} = S_p \Phi + S_c$ .

#### 4.3. DISCRETIZAÇÃO E OBTENÇÃO DAS EQUAÇÕES APROXIMADAS DE VOLUMES FINITOS PARA UMA SITUAÇÃO BIDIMENSIONAL EM TANQUES DE MISTURA

De acordo com PATANKAR (1980), PERIC' (1985), MALISKA (1995) e outros, existem dois modos de se obter as equações aproximadas pelo Método de Volumes Finitos (MVF). Primeiro, por meio de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos; segundo, por meio da equação diferencial na forma conservativa, integrando-as sobre o volume elementar, no espaço e no

tempo. No presente trabalho, o fenômeno hidrodinâmico de transferência de quantidade de movimento ocorre considerando as grandezas médias somente em escala espacial (regime permanente ou estacionário), e os termos que possuem derivadas temporais, como já foi mencionado anteriormente, serão desprezados, exceto no caso da concentração. Quando o escoamento torna-se estabelecido bem como os campos de pressão e grandezas turbulentas, procede-se ao cálculo da transferência de massa em regime transiente.

A disposição da malha deslocada para as componentes de velocidade foi primeiramente utilizada por HARLOW e WELCH (1965), em seu método MAC, sendo utilizada desde então por vários pesquisadores.

Segundo PATANKAR (1980) a adoção da malha deslocada não implica em grande diferença entre a equação de momento e as equações discretizadas para os outros  $\Phi$ 's ( $P$ ,  $V$ ,  $k$ ,  $\varepsilon$ , etc), os quais são calculadas nos pontos principais da malha. No volume de controle na direção radial ( $r$ ), a disposição da malha permite obter a diferença ( $P_P - P_E$ ) que pode ser usada para calcular a força de pressão que age sobre o volume de controle para a velocidade  $U_e$ . O mesmo ocorre para a velocidade  $W_n$ , na direção axial  $z$ .

O cálculo do coeficiente de difusão e a taxa de escoamento mássica nas faces do volume de controle de  $U_e$  requer, como já foi frisado anteriormente, uma interpolação apropriada, cuja equação de discretização pode ser escrita na forma algébrica como

$$a_e U_e = \sum_{n=1}^n a_{nb} U_{nb} + b + (P_P - P_E) A_e \quad (4.2)$$

onde  $A_e$  é a área sobre a qual age a diferença de pressão e  $(P_P - P_E)$  é a diferença de pressão.  $n$  é o número de pontos da malha. Os coeficientes  $a_{nb}$  carregam consigo os efeitos combinados da convecção e difusão nas faces dos volumes de controle.

A equação discretizada para  $W_n$  pode ser escrita na forma:

$$a_n W_n = \sum_{n=1}^n a_{nb} W_{nb} + b + (P_P - P_N) A_n \quad (4.3)$$

onde  $A_n$  é a área sobre a qual age a diferença de pressão e  $(P_P - P_N)$  é a diferença de pressão.

Uma vez que as equações de momento somente podem ser resolvidas quando o campo de pressão é conhecido ou estimado, o campo de velocidade não satisfaz a equação da continuidade. Assim, o campo de velocidade é imperfeito, já que foi baseado em um campo de pressão estimado (também imperfeito *a priori*). Desse modo, devemos utilizar um recurso para estimar novas pressões e velocidades, denotadas, respectivamente, por:  $P^*$ ,  $U^*$ ,  $W^*$  (Equação de Poisson). Ou seja, adota-se um processo de correção da avaliação (estimativa) inicial.

$$a_e U_e = \sum a_{nb} U_{nb} + b + (P_P - P_E) A_e \quad (4.4a)$$

$$a_e U_e^* = \sum a_{nb} U_{nb}^* + b + (P_P^* - P_E^*) A_e \quad (4.4b)$$

$$a_n W_n = \sum a_{nb} W_{nb} + b + (P_P - P_N) A_n \quad (4.5a)$$

$$a_n W_n^* = \sum a_{nb} W_{nb}^* + b + (P_P^* - P_N^*) A_n \quad (4.5b)$$

#### 4.4. AS CORREÇÕES DAS PRESSÕES E DAS VELOCIDADES

O objetivo desse procedimento é encontrar um modo de melhorar a estimativa de  $P^*$  tal que o campo de velocidade seja progressivamente o mais próximo possível daquele que satisfaça a equação da continuidade. Propõe-se, então, uma equação de correção para a pressão (PATANKAR, 1980)

$$P = P^* + P' \quad (4.6)$$

onde  $P^*$  é a pressão estimada e  $P'$  é denominado de *correção de pressão*. A seguir, necessitamos conhecer como as componentes de velocidade respondem a esta mudança na pressão. Da mesma forma, então, as correções de velocidade  $U'$  e  $W'$  correspondentes podem ser introduzidas de modo similar:

$$U = U^* + U' \quad (4.7a)$$

$$W = W^* + W' \quad (4.7b)$$

Se desprezarmos os termos do somatório nas equações 4.4a,b e 4.5a,b<sup>30</sup>, subtraindo 4.4b de 4.4a, e subtraindo 4.5b de 4.5a, obtém-se para as velocidades radial e axial, respectivamente:

$$(U_e - U_e^*)a_e = (P_P - P_E)A_e - (P_P^* - P_E^*)A_e \quad (4.8a)$$

$$(W_n - W_n^*)a_n = (P_P - P_N)A_n - (P_P^* - P_N^*)A_n \quad (4.8b)$$

Isto resulta em

$$U_e' = d_e(P_P' - P_E') \quad (4.9a)$$

$$W_n' = d_n(P_P' - P_N') \quad (4.9b)$$

onde

$$d_e = \frac{A_e}{a_e} \quad (4.10a)$$

$$d_n = \frac{A_n}{a_n} \quad (4.10b)$$

As equações 4.9a e 4.9b são denominadas de equações de correção de velocidade (equação de Poisson, vista anteriormente). As respectivas velocidades são calculadas por:

$$U_e = U_e^* + d_e(P_P' - P_E') \quad (4.11a)$$

$$W_n = W_n^* + d_n(P_P' - P_N') \quad (4.11b)$$

De posse das equações acima, temos todos os ingredientes necessários para obter a equação da correção da pressão  $P'$  (Método SIMPLER).

#### 4.5 A EQUAÇÃO DE CORREÇÃO DE PRESSÃO

Se substituirmos na equação da continuidade as componentes de velocidade pelas expressões dadas pelas fórmulas de correção de velocidade (equações 4.7a, 4.7b, 4.11a e 4.11b), obtemos, após um rearranjo, a seguinte equação de discretização para  $P'$ :

<sup>30</sup> Segundo PATANKAR (1980) a palavra SIMPLE tem sido usada para registrar a omissão do termo  $a_{nb} u'_{nb}$ . Esse termo representa uma influência indireta ou implícita da correção da pressão sobre a velocidade. Este termo não é incluído, portanto, porque este esquema é somente parcialmente implícito e não totalmente implícito.

$$a_p P_p = a_E P_E + a_W P_W + a_N P_N + a_S P_S + C_p \quad (4.12)$$

onde

$$a_E = \rho_e d_e \Delta z \Delta r \quad (4.13)$$

$$a_W = \rho_w d_w \Delta z \Delta r \quad (4.14)$$

$$a_N = \rho_n d_n \Delta z \Delta r \quad (4.15)$$

$$a_S = \rho_s d_s \Delta z \Delta r \quad (4.16)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (4.17)$$

$$C_p = [\rho U^*] \Delta z_w - [\rho U^*] \Delta z_e + [\rho W^*] \Delta r_s - [\rho W^*] \Delta r_n \quad (4.18)$$

Pode ser visto que o termo  $b$  das equações (4.4 - 4.5) na equação de correção de pressão é avaliado em termos de velocidades estimadas. Se  $b$  é zero, significa dizer que as velocidades de partida (estimadas), satisfazem a equação da continuidade, e nenhuma correção de pressão é necessária. De posse das equações algébricas pertinentes é possível utilizar processos iterativos, para a solução do escoamento hidrodinâmico.

Abaixo apresentam-se os procedimentos resumidos da família de métodos iterativos SIMPLE, descritos por PATANKAR e SPALDING (1972) e o método SIMPLER, mais extensamente utilizado por PATANKAR (1980). Descreve-se também o método SIMPLEC (SIMPLE-Consistente), proposto por Van DOORMAL e RAITHBY (1984).

## 4.6 DESCRIÇÃO DOS ALGORITMOS SIMPLE, SIMPLER E SIMPLEC

### 4.6.1 O ALGORITMO SIMPLE - *Semi IMPLICIT Linked Equations*

A sequência de passos do algoritmo é:

- ii) admitir um campo de pressão  $P^*$ ;
- ii) resolver os sistemas algébricos obtidos a partir das equações de conservação da quantidade de movimento, obtendo os campos de velocidade intermediários  $U^*$ ,  $V^*$ , e  $W^*$ ;
- iii) resolver a equação de correção de pressão  $P'$  utilizando a equação conhecida como a de Poisson 4.11a e 4.11b;
- iv) calcular o novo campo de pressão somando  $P'$  a  $P^*$ , a partir da equação 4.11a e 4.11b adicionando  $P'$  em  $P^*$ ;

- v) calcular  $U$  e  $W$  a partir dos valores anteriores (antigos) usando as fórmulas de correção de velocidades, ou seja, as equações 4.9a e 4.9b;
- vi) resolver os sistemas algébricos (equações de discretização) relativos aos  $\Phi$ 's, tais como concentração, energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação e velocidade tangencial,
- vii) admitir que o novo campo de pressão seja o campo de pressão  $P^*$  e voltar ao segundo passo do procedimento até que a convergência seja atingida.

#### 4.6.2 O ALGORITMO SIMPLER

O método SIMPLER foi criado para corrigir o que se considerou uma “exagerada” correção de pressão do método SIMPLE, fazendo-se necessário o uso de subrelaxação. Tal exagero na correção do método SIMPLE é devido a omissão dos termos  $\sum a_{nb} u'_{nb}$  na equação algébrica geral.

Segundo PATANKAR (1980) o método SIMPLER emprega a equação de pressão somente para a tarefa de corrigir velocidades e fornece alguns outros meios de obter o campo de pressão, tornando-se um algoritmo de cálculo mais eficiente. Entretanto, embora o método SIMPLER seja mais eficiente, resultando em uma convergência mais rápida do que o do SIMPLE, é reconhecido que as iterações para o SIMPLER envolvem maior esforço computacional. A sua vantagem reside no fato de que mesmo tendo um esforço computacional maior, este é recompensado pelo menor número de iterações para alcançar a convergência, resultando em uma economia global para o SIMPLER quando ambos os métodos são comparados.

No algoritmo SIMPLER a equação para obter o campo de pressão é dada por:

$$U_e = \frac{\sum a_{nb} U_{nb} + b}{a_e} + d_e (P_P - P_E) \quad (4.19)$$

onde  $d_e$  é definido pela equação 4.10a. Define-se agora uma pseudovelocidade denominada de  $\hat{U}_e$

$$\hat{U}_e = \frac{\sum a_{nb} U_{nb} + b}{a_e} \quad (4.20)$$

Nota-se que  $\hat{U}_e$  é composto pelas velocidades  $U_{nb}$ , que não contém termos de pressão. A equação 4.19 transforma-se em

$$U_e = \hat{U}_e + d_e (P_E - P_P) \quad (4.21)$$

onde

$$\hat{U}_e = \frac{a_P^U U_e(i, j-1) + a_E^U U_e(i, j+1) + a_{ne}^U U_e(i+1, j) + a_{se}^U U_e(i-1, j) + S_C^e}{a_e - S_P^e} \quad (4.21a)$$

$$\hat{U}_w = \frac{a_P^U U_w(i, j+1) + a_W^U U_w(i, j-1) + a_{nw}^U U_w(i+1, j) + a_{sw}^U U_w(i-1, j) + S_C^w}{a_w - S_P^w} \quad (4.21b)$$

Da mesma forma, podemos também escrever:

$$W_n = \hat{W}_n + d_n (P_W - P_P) \quad (4.22)$$

onde

$$\hat{W}_n = \frac{a_P^W W_n(i-1, j) + a_N^W W_n(i+1, j) + a_{ne}^W W_n(i, j+1) + a_{sw}^W W_n(i, j-1) + S_C^n}{a_n - S_P^n} \quad (4.22a)$$

$$\hat{W}_s = \frac{a_P^W W_s(i+1, j) + a_S^W W_s(i-1, j) + a_{ne}^W W_s(i, j+1) + a_{sw}^W W_s(i, j-1) + S_C^s}{a_s - S_P^s} \quad (4.22b)$$

Verifica-se que existe similaridade entre essas duas equações e as equações 4.11a e 4.11b, onde  $\hat{U}_e$  e  $\hat{W}_n$  surgem no lugar de  $U^*$  e  $W^*$  e a própria pressão  $P$  toma lugar de  $P'$ . Desta forma, seguindo os passos da correção da pressão anterior obtém-se:

$$a_P P_P' = a_E P_E' + a_W P_W' + a_N P_N' + a_S P_S' + C_P' \quad (4.23)$$

onde

$$a_E = \rho_e d_e \Delta z \Delta r \quad (4.24)$$

$$a_W = \rho_w d_w \Delta z \Delta r \quad (4.25)$$

$$a_N = \rho_n d_n \Delta z \Delta r \quad (4.26)$$

$$a_S = \rho_s d_s \Delta z \Delta r \quad (4.27)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (4.28)$$

$$C'_p = [\rho u^*] \Delta z_w - [\rho u^*] \Delta z_e + [\rho w^*] \Delta r_s - [\rho w^*] \Delta r_n \quad (4.29)$$

Observa-se que  $C'_p$  é a única diferença entre a equação de pressão 4.23 e a equação de pressão 4.12. De acordo com PATANKAR (1980) a expressão 4.20 usa para  $C'_p$  as pseudovelocidades, enquanto que a expressão 4.12 usa velocidades estimadas.

A seguir é apresentada a sequência do algoritmo SIMPLER:

- i) admitir um suposto campo de velocidades;
- ii) calcular os coeficientes para as equações de momento e depois calcular  $\hat{U}_e$  e  $\hat{W}_n$  a partir das equações semelhantes às equações (4.21) e (4.20), pela substituição dos valores  $U_{nb}$  e  $W_{nb}$ ;
- iii) calcular os coeficientes para a equação de correção de pressão semelhante a (4.19), e resolvê-la para obter o campo de pressão (Equação 4.23);
- iv) tratar este campo de pressão como  $P^*$ , resolver as equações de momento para obter  $U^*$  e  $W^*$ ;
- v) calcular a fonte de massa  $b$ , e então resolver a equação de  $P'$ ;
- vi) corrigir o campo de velocidade pelo uso das equações da continuidade, porém não corrigir a pressão;
- vii) resolver as equações de discretização para os outros  $\Phi$ 's se necessário;
- viii) retornar ao passo 2 até alcançar a convergência.

#### 4.6.3 O ALGORITMO SIMPLEC

Neste algoritmo, a correção do campo de velocidades (quinto passo do procedimento SIMPLE) é executada de modo 'unidimensional', como pode ser verificado pela equação abaixo:

$$U_e = U_e^* + d_e (P_p' - P_E') \quad (4.30)$$

onde  $d_e$  é o coeficiente relativo ao ajuste de pressão.

De acordo com ZERBINI (1991) no procedimento SIMPLE  $d_e$  é obtido por meio de uma aproximação grosseira das equações de conservação da quantidade de movimento e é igual à relação entre área da face direita do volume de controle e o coeficiente  $a_e$ , da equação algébrica referente a esta equação de conservação. Já no procedimento SIMPLEC a aproximação realizada é mais consistente e a expressão de  $d_e$  torna-se igual a:

$$d_e = \frac{A_e}{a_e - \sum a_{nb}} \quad (4.31)$$

onde  $A_e$  é igual a área lateral direita do volume de controle,  $a_e$  é o coeficiente da equação algébrica para a quantidade de movimento na direção radial ( $r$ ),  $\sum a_{nb}$  é a somatória dos coeficientes da equação algébrica para a quantidade de movimento na direção radial ( $r$ ), excluindo-se  $a_e$ . Similarmente, para a direção axial ( $z$ ), tem-se:

$$W_n = W_n^* + d_n (P_P' - P_N') \quad (4.32)$$

$$d_n = \frac{A_n}{a_n - \sum a_{nb}} \quad (4.33)$$

Verificou-se ser também necessária a utilização da sub-relaxação, ou seja, o campo da variável  $\Phi$ , obtido por solução do seu sistema de equações algébrico, deve ser substituído por:

$$\Phi = \omega \Phi^{novo} + (1 - \omega) \Phi^{velho} \quad (4.34)$$

onde

$\omega$  é o coeficiente de sub-relaxação ( $0 < \omega < 1$ )

$\Phi^{novo}$  são os valores de  $\Phi$  recém-obtidos

$\Phi^{velho}$  são os valores de  $\Phi$  no ciclo anterior

Como não existe, *a priori*, um modo de determinação dos valores de  $\omega$ , de modo que o procedimento apresente convergência (maior ou menor velocidade), o experimento numérico é o único método recomendado para se calcular o valor ótimo de  $\omega$ .

#### 4.7 MÉTODOS NUMÉRICOS APLICADOS AOS ESCOAMENTOS ELÍPTICOS COM RECIRCULAÇÃO

No ítem anterior foi apresentada a metodologia MVF para o problema de transferência de Quantidade de Movimento para tanques cilíndricos com agitação hidrodinâmica utilizando o modelo de turbulência  $k-\varepsilon$ . Inicialmente descreveu-se a utilização do método numérico para resolver as equações diferenciais governantes, tais como as equações de momento e da continuidade. Estas equações não foram aqui apresentadas em todos os seus detalhes por questão de conveniência, sem a perda de rigor, e o foco central recai efetivamente mais sobre sua solução do que sobre seu significado físico.

Na figura - 4.1 são apresentadas as etapas do desenvolvimento do algoritmo para simular a hidrodinâmica nos tanques de mistura. Primeiramente as equações diferenciais gerais são arroladas. Depois elas são discretizadas para  $U$ ,  $W$ ,  $k$ ,  $\varepsilon$  e  $C$  (concentração). Passa-se à resolução de  $U$ , e  $W$  (que são determinadas nos pontos das faces do volume de controle - *via* algoritmo SIMPLER) e calculam-se os campos de  $k$  e  $\varepsilon$  (pontos nodais) e, conseqüentemente, os campos de viscosidade turbulenta ou efetiva. Depois determina-se o campo de concentração (pontos nodais) no tanque e na superfície (condições de contorno especiais).

Na formulação para o escoamento de fluido, somente os casos incompressíveis foram descritos. O termo incompressível refere-se apenas aos efeitos de pressão sobre a densidade ou massa específica. Ademais, a ênfase é dada para a obtenção da solução em regime permanente e a técnica numérica descrita emprega uma malha em coordenadas cilíndricas. Apenas para o caso da concentração as equações discretizadas utilizaram o termo de variação temporal.

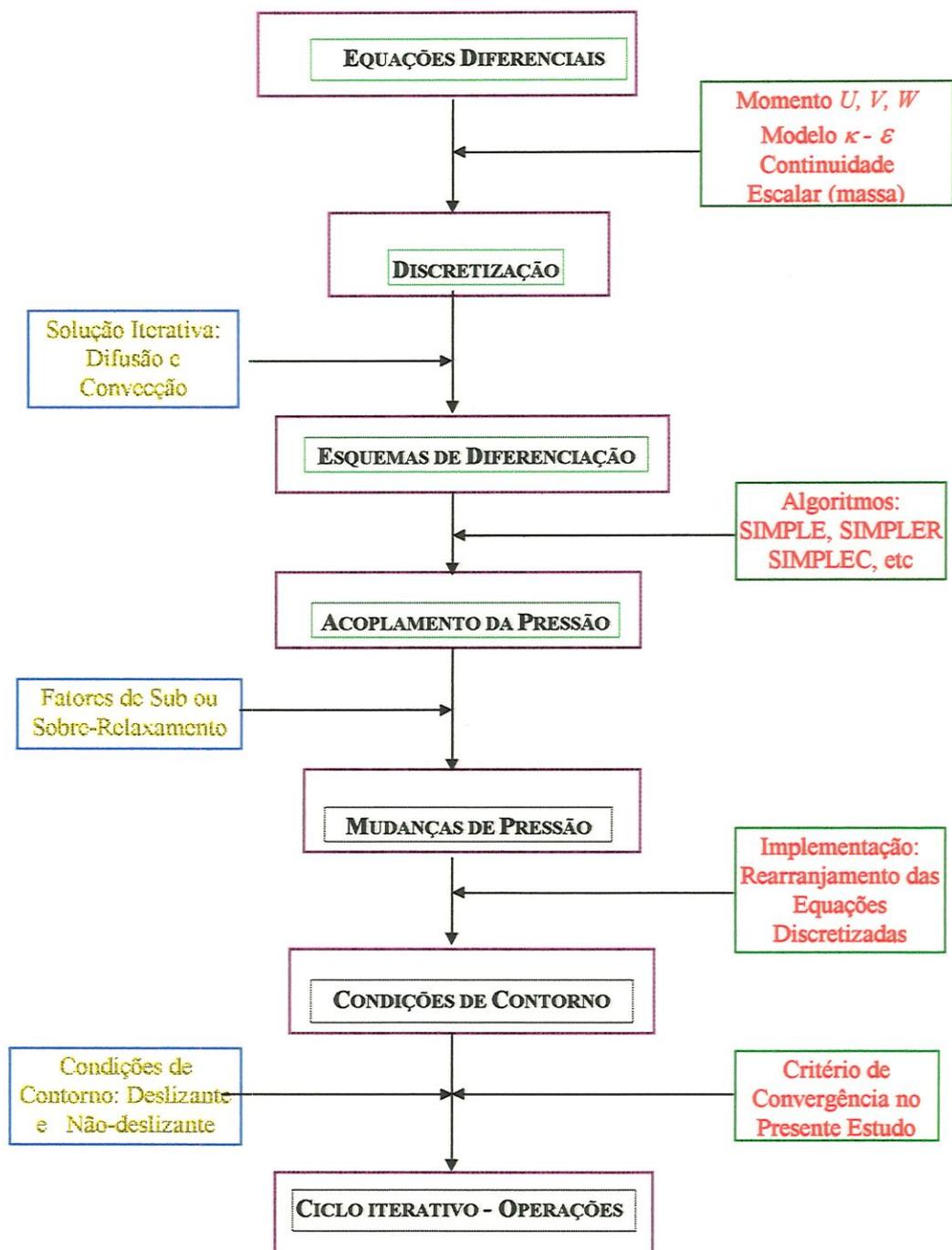


Figura 4.1: Esquema do Fluxograma Geral do Algoritmo.

#### 4.7.1 CARACTERÍSTICAS CONSTRUTIVAS DOS TANQUES DE MISTURA - DOMÍNIOS FÍSICOS DE DISCRETIZAÇÃO

Um dos sistemas estudados na presente simulação foi aquele baseado no trabalho de CUNHA (1993), obedecendo aos padrões de BATES *et al.* (1963). As características construtivas são mostradas na tabela 4.1a.

**Tabela 4.1a:** Dimensões do conjunto de agitação e tanques de mistura utilizadas em CUNHA (1993)<sup>31</sup>.

Características Geométricas	Dimensões
Diâmetro dos Tanques	300 mm
Diâmetro das Turbinas	100 mm
Largura das Lâminas (Pás) de cada Turbina	12,5 mm
Número de Lâminas de Cada Turbina	6
Ângulo de Inclinação das Lâminas das Turbinas	45°
Largura das Lâminas dos Inibidores de Vórtices	25 mm
Número de Lâminas de Cada Inibidor de Vórtices	8
Distância das Turbinas com Relação ao Fundo do Tanque	100 mm
Número de Turbinas no Tanque	1
Nível da Água no Tanque	30 cm
Faixa de Velocidade Angular (RPM) – CUNHA (1993)	82-1702
Faixa de Velocidade Angular (RPM) – MOMESSO (1996)	72-1997

Outros sistemas estudados na presente simulação foram os de HSIEH *et al.* (1993) e BARBOSA (1989). Porém, estes últimos não obedeceram rigorosamente aos padrões de BATES *et al.* (1963). As características construtivas dos respectivos autores são mostradas nas tabelas 4.1b e 4.1c. Todos os testes dos referidos autores foram a 20 °C.

<sup>31</sup> O programa TANK.FOR lê também os arquivos (extensão DAT) com as características construtivas dos autores MOMESSO (1996), HSIEH *et al.* (1993) e BARBOSA (1989). Entretanto, é bom observar que MOMESSO (1996) utilizou o mesmo tanque que CUNHA (1993). Por isso não existe uma tabela para os dados deste último autor.

**Tabela 4.1b:** Dimensões do conjunto de agitação e tanques de mistura utilizadas em HSIEH *et al.* 1993).

Características Geométricas	Dimensões
Diâmetro dos Tanques	247 mm
Diâmetro das Turbinas	127 mm
Largura das Lâminas (Pás) de cada Turbina	38 mm
Número de Lâminas de Cada Turbina	2-4
Ângulo de Inclinação das Lâminas das Turbinas	Não-Padrão
Largura das Lâminas dos Inibidores de Vórtices	22 mm
Número de Lâminas de Cada Inibidor de Vórtices	4
Distância das Turbinas com Relação ao Fundo do Tanque	$\cong 122$ mm
Número de Turbinas no Tanque	1 <sup>32</sup>
Nível da Água no Tanque	36,8 cm
Faixa de Velocidade Angular (RPM)	150-500

**Tabela 4.1c:** Dimensões do conjunto de agitação e tanques de mistura utilizadas em BARBOSA (1989).

Características Geométricas	Dimensões
Diâmetro dos Tanques	610 mm
Diâmetro das Turbinas	$\cong 150$ mm
Largura das Lâminas (Pás) de cada Turbina	27 mm
Número de Lâminas de Cada Turbina	4
Ângulo de Inclinação das Lâminas das Turbinas	45°
Largura das Lâminas dos Inibidores de Vórtices	31,5 mm
Número de Lâminas de Cada Inibidor de Vórtices	6
Distância das Turbinas com Relação ao Fundo do Tanque	105 mm
Número de Turbinas no Tanque	1
Nível da Água no Tanque	$\cong 35$ cm
Faixa de Velocidade Angular (RPM)	56-370

<sup>32</sup> Apesar do sistema apresentar 2 turbinas, considerou-se apenas uma localizada num ponto médio entre ambas, de forma que representasse uma altura média aproximada (1/3 da altura do nível d'água).

A figura (4.2) mostra as características geométricas do tanque de agitação e os detalhes construtivos para execução de experimentos de transferência de gases na interface ar-água, para os testes de CUNHA (1993).

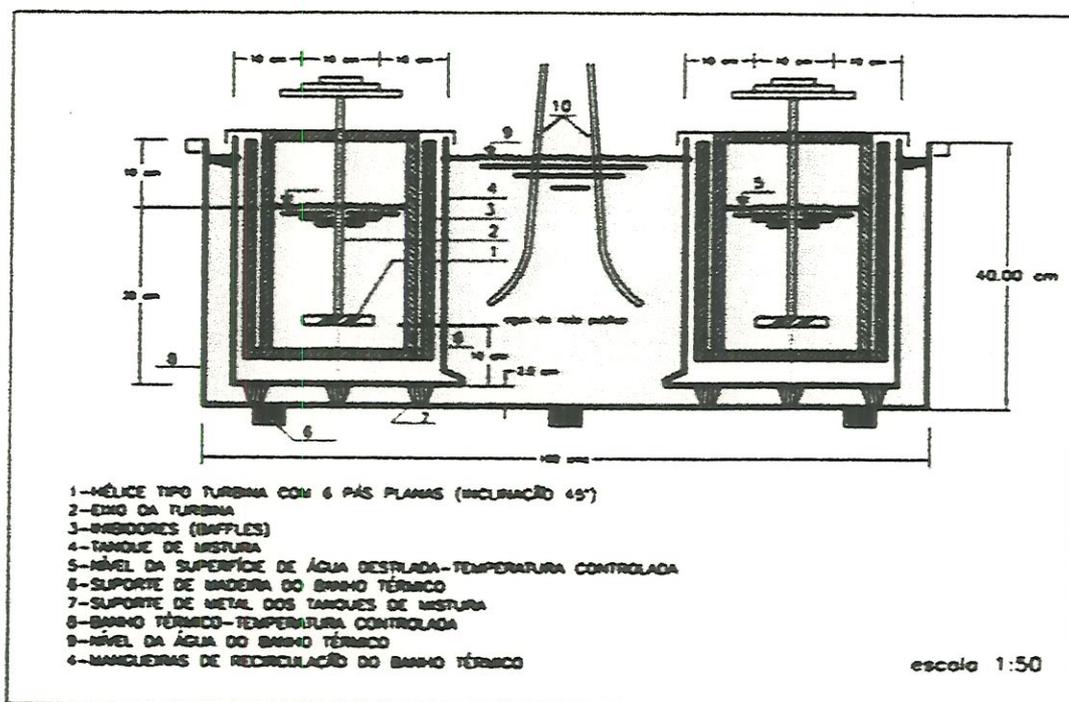
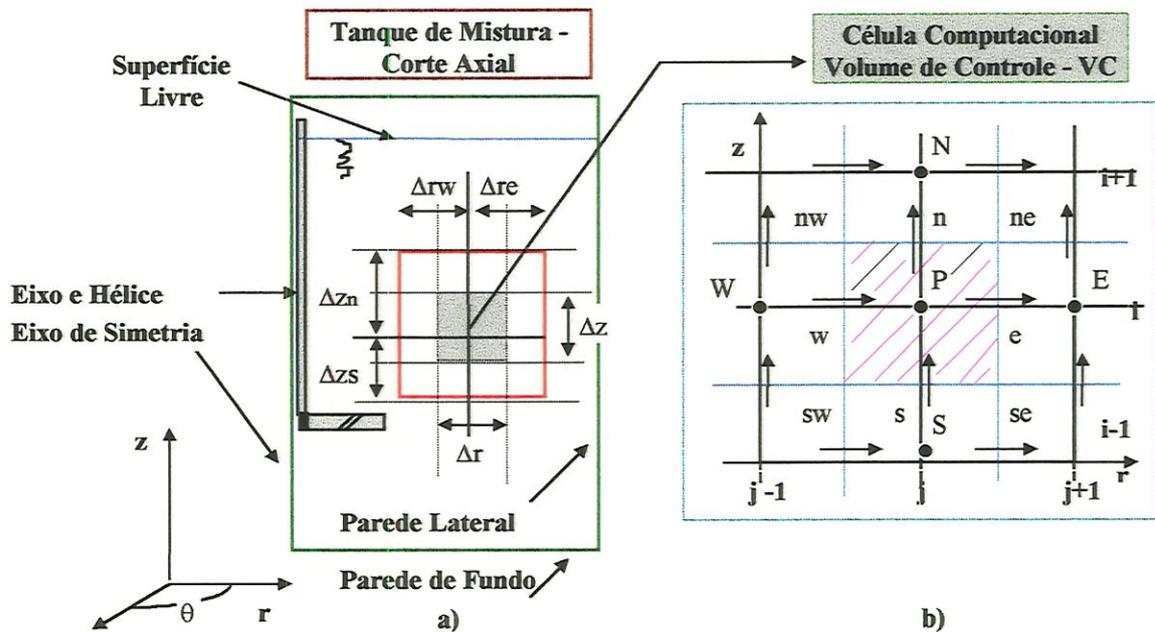


Figura 4.2: Tanque de Agitação Hidrodinâmica (CUNHA, 1993) e características construtivas. As temperaturas da água dos tanques de mistura foram de aproximadamente 15, 20, 25 e 30 °C e o número de revoluções imposta ao impulsor rotativo (Turbina tipo *PTD*) ficou na faixa de 82 a 1700 rpm.

#### 4.7.2 MÉTODO UTILIZADO PARA A PREVISÃO DO ESCOAMENTO

A figura 4.3a mostra o domínio de cálculo para o presente estudo subdividido em volumes de controle, utilizando a vantagem da simetria axial existente. As linhas pontilhadas denotam as faces do volume de controle. Essas linhas são paralelas às coordenadas nas direções  $r$  e  $z$ . O cruzamento das linhas cheias denotam os nós da malha e estes são definidos como ponto central do volume de controle. É conveniente definir primeiramente a localização das faces do volume de controle e depois os pontos (nós) da malha. A figura 4.3b mostra seções onde as componentes de velocidade são representadas por setas. O procedimento aqui adotado é o de “malhas deslocadas”, isto é, as velocidades são calculadas nos centros das faces do volume de

controle. Por meio deste procedimento as velocidades são determinadas em pontos estratégicos, permitindo imediatamente o seu uso para o cálculo das vazões mássicas (equação da continuidade) e para obter os coeficientes dos termos de convecção nas equações de transporte turbulento de  $k$  e  $\varepsilon$  (equações de transporte de quantidade de movimento).



**Figura 4.3:** a) Domínio de cálculo (Malha de Integração); b) Arranjo da malha deslocada com os nós no centro do volume de controle e célula computacional elementar bi-dimensional. Em b) as posições deslocadas são para  $U \Rightarrow$ , para  $W \uparrow$ , e para outras variáveis = ●, sendo que nw = noroeste, sw = sudoeste, se = sudeste, ne = nordeste (nas faces do volume de controle) e nw = noroeste, sw = sudoeste, se = sudeste, ne = nordeste (nos pontos nodais). Observa-se que na presente modelagem não se considerou a presença dos inibidores de vórtices por simplicidade.

A descrição feita forneceu os ingredientes necessários para efetuar a discretização da equação diferencial 4.35a ou 4.35b, para  $U$  e  $W$ , na forma de taxas de fluxo nas direções  $r$  e  $z$ , respectivamente. De acordo com PATANKAR (1980) tem-se:

$$\frac{\partial J_r}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r U \Phi) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \Gamma_{\Phi, \text{eff}} r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) \quad (4.35a)$$

$$\frac{\partial J_z}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} (\rho W \Phi) - \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\Phi, \text{eff}} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \quad (4.35b)$$

$$\frac{\partial J_r}{\partial r} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = S_{\Phi (total)} \quad (4.36)$$

onde  $J_r$  e  $J_z$  são os fluxos totais (convecção e difusão), nas direções radial e axial respectivamente.

Integrando as equações 4.35a e 4.35b (ou 4.36) para um volume de controle elementar bi-dimensional típico, utilizando o teorema de Gauss e admitindo que o valor de  $\Phi$  é o valor que prevalece na região de estudo, obtém-se a equação

$$J_E - J_W + J_N - J_S = (S_P \Phi + S_C) \Delta r \Delta z \quad (4.37)$$

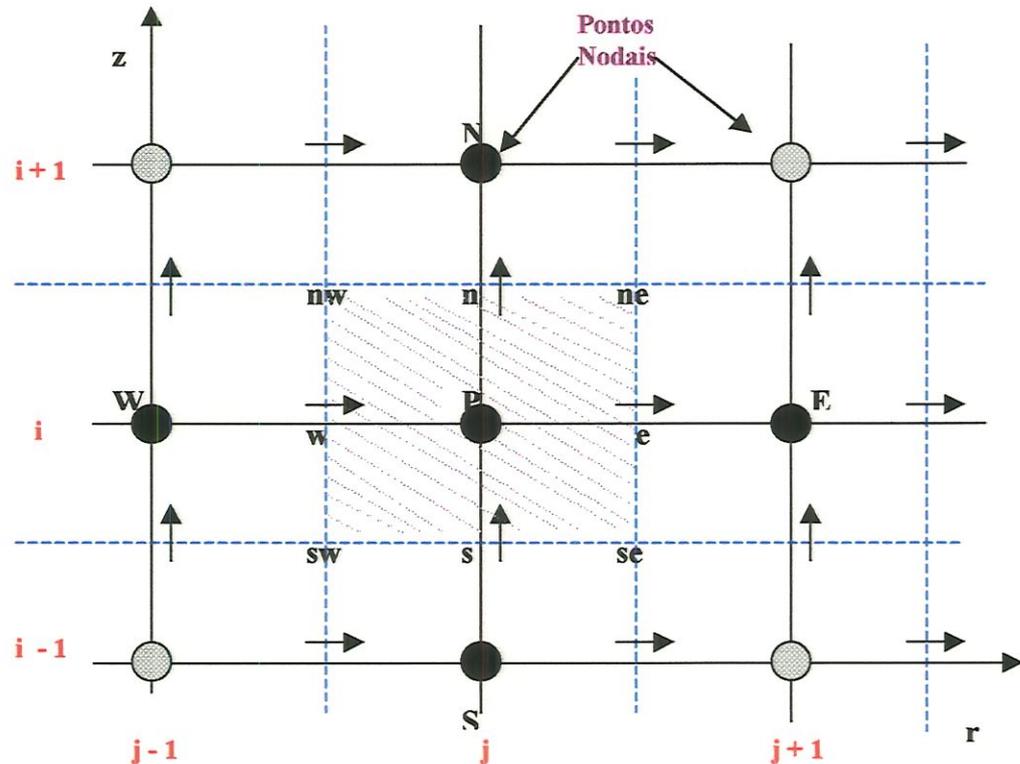
onde o termo fonte está representado e linearizado da forma usual.

Os volumes de controle para  $U$  e  $W$  são respectivamente mostrados nas figuras 4.4. e 4.5a,b,c,d. O resultado da integração da equação 4.37 nos respectivos volumes de controle para  $U_e$  e  $W_n$  é mostrado na equação 4.38.

$$\begin{aligned} & \left[ \rho U \Phi - \Gamma^* \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right]_{A_n} - \left[ \rho U \Phi - \Gamma^* \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right]_{A_w} + \left[ \rho W \Phi - \Gamma^* \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right]_{A_e} - \left[ \rho W \Phi - \Gamma^* \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right]_{A_s} \dots \\ & \dots = (S_P \Phi_P + S_C) \Delta V \end{aligned} \quad (4.38)$$

onde

- $A_n$  área superior (norte)
- $A_s$  área inferior (sul)
- $A_e$  área lateral direita (leste)
- $A_w$  área lateral esquerda (oeste)
- $\Delta V$  volume do elemento (volume do volume de controle)
- $[ ]_i$  indicam que o valor da função deve ser avaliado na superfície  $i$ . ( $i = n, s, e, w$ ).



**Figura 4.4:** Detalhes da malha deslocada bi-dimensional, onde os componentes de velocidade são representados por pequenas setas. Na malha deslocada, os componentes de velocidade são calculados nos pontos situados nos centros das faces do volume de controle (VC), justamente onde são mais necessários para os cálculos de vazões mássicas que entram e saem do balanço de massa determinadas pela equação da continuidade, bem como nos termos de convecção das equações de  $C$ ,  $k$  e  $\varepsilon$ . Desta forma, a diferença de pressão entre dois pontos adjacentes funciona como força motriz que impulsiona os componente de velocidade entre eles.

Abaixo são mostrados os volumes de controle para as velocidades (malha deslocada) para  $U_e$ ,  $U_w$ ,  $W_n$  e  $W_s$ . Observe que para cada velocidade o volume de controle apresenta uma localização específica com relação ao ponto central P. Se imaginarmos o volume de controle mostrado na figura 4.5a, observamos os pontos que influenciam  $U_e$ , que são indicados pela localização  $ne$  e  $se$ . No início do processo de cálculo essas velocidades são estimadas (subrotina CONDIÇÕES\_INICIAS), a fim de se calcular os valores dos coeficientes da matriz esparsa e inicializar o processo iterativo. O mesmo acontece com as outras velocidades.

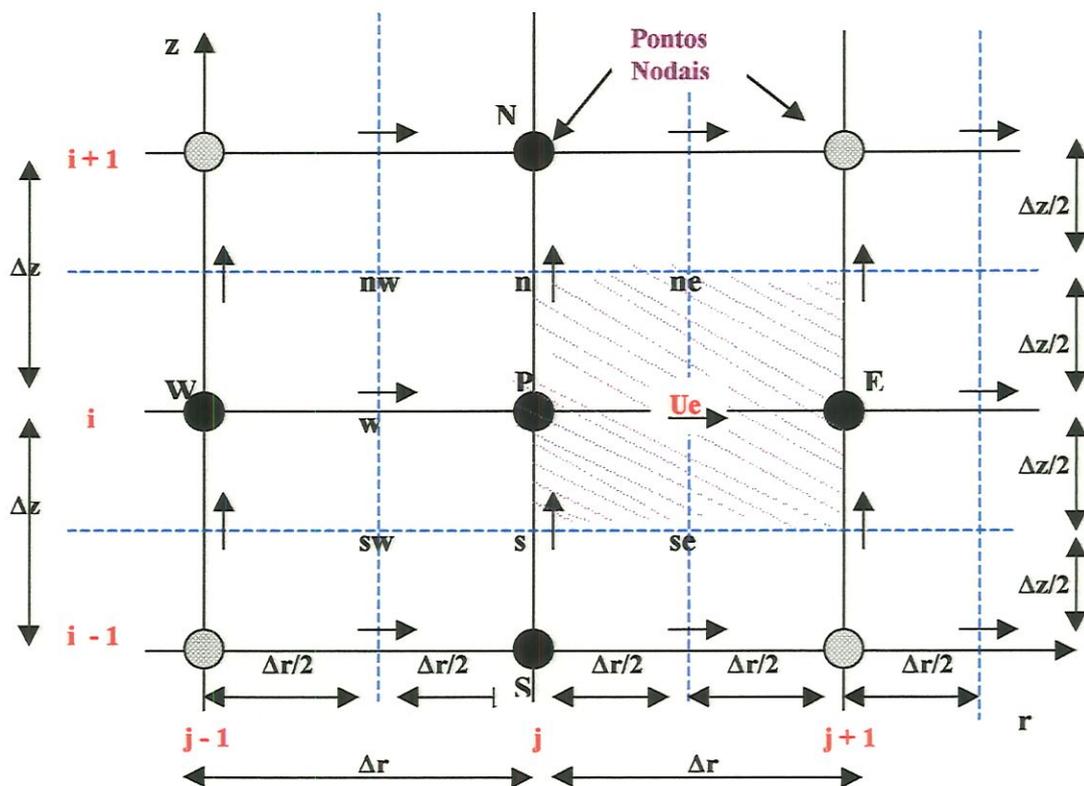


Figura 4.5a: Volume de controle para  $U_e$ .

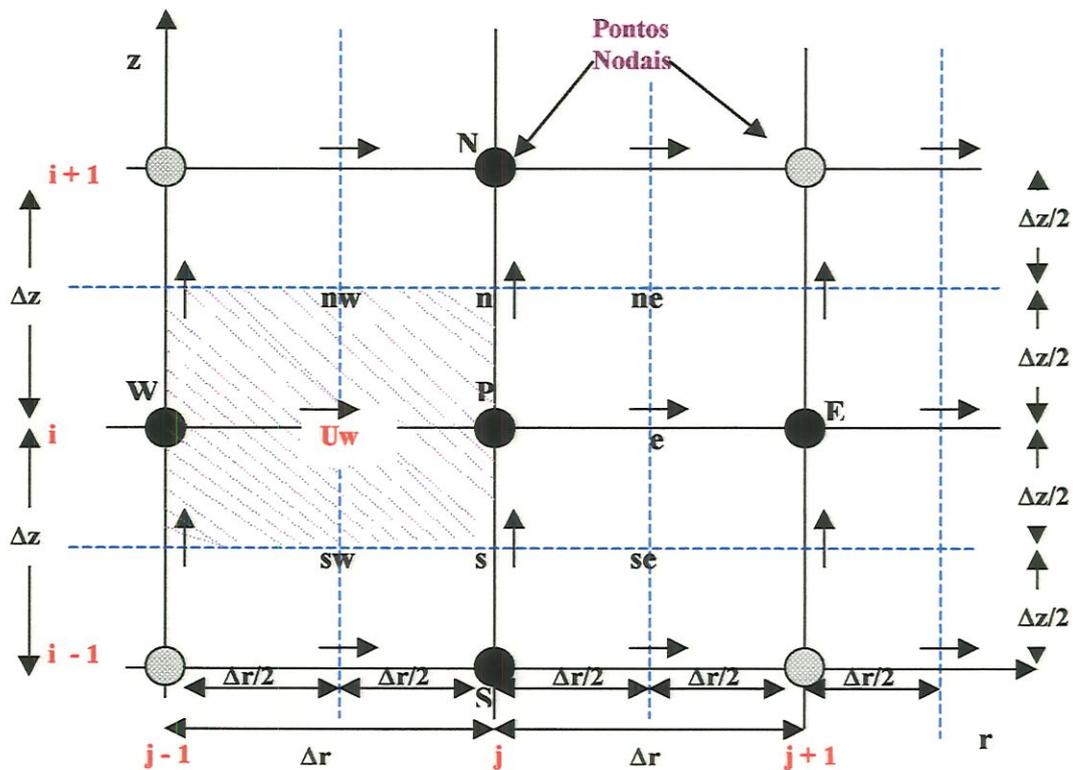


Figura 4.5b: Volume de controle para  $U_w$ .



A equação da continuidade pode ser obtida substituindo  $\Phi = 1$  e  $S\phi = 0$  na equação 4.35. Como não há variações em  $\theta$  a equação 4.37 ou 4.38 torna-se:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial (r \rho U)}{\partial r} + \frac{\partial (\rho W)}{\partial z} = 0 \quad (4.39)$$

integrando (4.39), tem-se a equação da continuidade:

$$[\rho UA]_E - [\rho UA]_W + [\rho WA]_N - [\rho WA]_S = 0 \quad (4.40)$$

Na verdade a equação 4.40 é utilizada nos procedimentos da família SIMPLE como equação de ligação entre as equações de quantidade de movimento e as correções de pressão e velocidade, através dos termos  $C_p$  e  $C'_p$ , os quais controlam os balanços de massa em cada volume de controle. Quando os valores de  $C_p$  e  $C'_p$  são considerados próximos de zero ou de um valor previamente estipulado (na última iteração numérica), significa que os campo de velocidade e pressão são os corretos e se chegou a convergência do processo iterativo. A formulação geral para as velocidades são dadas abaixo.

Rearranjando a equação 4.38 na forma matricial geral, tem-se a equação de cinco pontos para  $W_n$ .

$$(A_n - S_n)W_{n(I,J)} = A_N^W W_{n(I+1,J)} + A_P^W W_{n(I-1,J)} + A_{ne}^W W_{n(I,J+1)} + A_{nw}^W W_{n(I-1,J)} + B_n^W + \frac{\alpha_n^W}{\rho} (P_P - P_N) \quad (4.41)$$

onde

$$A_n = A_N^W + A_P^W + A_{ne}^W + A_{nw}^W \quad (4.42)$$

$$S_n = S_{P_n}^W W_n - T_n \quad (4.43)$$

$$B_n^W = S_{C_n}^W + T_n W_{n(I,J)}^o \quad (4.44)$$

Rearranjando a equação 4.38 na forma matricial geral, tem-se a equação de cinco pontos para  $W_s$ .

$$(A_s - S_s)W_{s(I,J)} = A_P^W W_{s(I+1,J)} + A_S^W W_{s(I-1,J)} + A_{se}^W W_{s(I,J+1)} + A_{sw}^W W_{s(I,J-1)} + B_s^W + \frac{a_s^W}{\rho} (P_S - P_P) \quad (4.45)$$

onde

$$A_s = A_P^W + A_S^W + A_{sw}^W + A_{se}^W \quad (4.46)$$

$$S_s = S_{P_s}^W - T_s \quad (4.47)$$

$$B_s^W = S_{C_s}^W + T_s W_{s(I,J)}^o \quad (4.48)$$

Rearranjando a equação 4.38 na forma matricial geral, tem-se a equação de cinco pontos para  $U_e$ .

$$(A_e - S_e)U_{e(I,J)} = A_E^U U_{e(I,J+1)} + A_P^U U_{e(I,J-1)} + A_{ne}^U U_{e(I+1,J)} + A_{se}^U U_{e(I-1,J)} + S_{C_e}^U + \frac{a_e^U}{\rho} (P_P - P_E) \quad (4.49)$$

onde

$$A_e = A_E^U + A_P^U + A_{nw}^U + A_{se}^U \quad (4.50)$$

$$S_e = S_{P_e}^U U_e - T_e \quad (4.51)$$

$$B_e^U = S_{C_e}^U + T_e U_{e(I,J)}^o \quad (4.52)$$

Rearranjando a equação 4.38 na forma matricial geral, tem-se a equação de cinco pontos para  $U_w$ .

$$(A_w - S_w)U_{w(I,J)} = A_P^U U_{w(I,J+1)} + A_W^U U_{w(I,J)} + A_{nw}^U U_{w(I-1,J)} + A_{sw}^U U_{w(I+1,J)} + S_{C_w}^U + \frac{a_w^U}{\rho} (P_P - P_W) \quad (4.53)$$

onde

$$A_w = A_P^U + A_W^U + A_{nw}^U + A_{sw}^U \quad (4.54)$$

$$S_w = S_{P_w}^U U_w - T_w \quad (4.55)$$

$$B_w^U = S_{C_w}^U + T_w U_{w(I,J)}^o \quad (4.56)$$

Rearranjando a equação 4.38 na forma matricial geral, tem-se a equação de cinco pontos para a variável genérica,  $\Phi(P, C, k, \varepsilon)$

$$(A_P^\Phi - S_P^\Phi)\Phi_P = A_N^\Phi\Phi_{N(I,J+1)} + A_S^\Phi\Phi_{S(I,J-1)} + A_E^\Phi\Phi_{n(I+1,J)} + A_W^\Phi\Phi_{W(I-1,J)} + S_U^\Phi \quad (4.57)$$

$$A_P = A_N^\Phi + A_S^\Phi + A_E^\Phi + A_W^\Phi \quad (4.58)$$

$$S_P^\Phi = B_P^\Phi - T_P \quad (4.59)$$

$$S_U^\Phi = C_P^\Phi + T_P^\Phi\Phi_P^\Phi \quad (4.60)$$

$$T_P = V_P / \Delta t \quad (4.61)$$

A linearização do termo fonte e condições de contorno:

$$S_\Phi V_P = B_P^\Phi\Phi_P + C_P^\Phi \quad (4.62)$$

onde  $B_P^\Phi\Phi_P$  e  $C_P^\Phi$ , foram calculados apropriadamente, de acordo com as descrições estipulados pela tabela 3.6.  $T_P = V_P / \Delta t$ ,  $T_E = V_E / \Delta t$ ,  $T_W = V_W / \Delta t$ ,  $T_N = V_N / \Delta t$  e  $T_S = V_S / \Delta t$  são termos de volume/intervalo de tempo, que constam nas equações 4.43-44, 4.47-48, 4.51-52, 4.55-56 e 4.60-61. Porém, neste caso, este termo só será útil para o caso da variação da concentração.

As equações de cinco pontos finais *vetorizadas* de  $U_e, U_w, W_n, W_s$ , e  $\Phi$  são apresentadas da seguinte forma:

$$(A_n - S_n)W_{n(P)} = A_{ne}^W W_{n(E)} + A_{nw}^W W_{n(W)} + A_{nN}^W W_{n(N)} + A_{nS}^W W_{n(S)} + B_n^W + \frac{a_n^W}{\rho} (P_P - P_N) \quad (4.63)$$

$$(A_s - S_s)W_{s(P)} = A_{se}^W W_{s(E)} + A_{sw}^W W_{s(W)} + A_{sP}^W W_{s(N)} + A_{sS}^W W_{s(S)} + B_s^W + \frac{a_s^W}{\rho} (P_S - P_P) \quad (4.64)$$

$$(A_e - S_e)U_{e(P)} = A_{eE}^U U_{e(E)} + A_{eP}^U U_{e(W)} + A_{eN}^U U_{e(N)} + A_{eS}^U U_{e(S)} + S_{C_e}^U + \frac{a_e^U}{\rho} (P_P - P_E) \quad (4.65)$$

$$(A_w - S_w)U_{w(P)} = A_{wE}^U U_{w(E)} + A_{wW}^U U_{w(W)} + A_{wN}^U U_{w(N)} + A_{wS}^U U_{w(S)} + S_{C_w}^U + \frac{a_w^U}{\rho} (P_P - P_W) \quad (4.66)$$

$$(A_P^\Phi - S_P^\Phi)\Phi_P = A_E^\Phi\Phi_E + A_W^\Phi\Phi_W + A_N^\Phi\Phi_N + A_S^\Phi\Phi_S + S_{C_U}^\Phi \quad (4.67)$$

### 4.7.3 CONDIÇÕES DE CONTORNO - ASPECTOS GERAIS DO MÉTODO NUMÉRICO

Como foi dito por EIGER (1997), um dos aspectos mais críticos da modelagem da turbulência é a definição das condições de contorno, particularmente relacionado às paredes sólidas, superfícies livres e cantos.

Sobre o eixo de simetria, isto é, em  $r = 0$ , as condições de contorno são:

$$\begin{aligned} U &= 0 \\ \frac{\partial \Phi}{\partial r} &= 0 \\ \Phi &\neq U \end{aligned} \quad (4.68)$$

Nas paredes impermeáveis do tanque: fundo,  $z = 0$ , parede lateral,  $r = R$  (raio do tanque) e eixo físico da turbina,  $r = 0$ , foram empregadas as condições de não-deslizamento (no-slip). Tem-se então:

$$\begin{aligned} (W &= 0) \\ (U &= 0) \end{aligned} \quad (4.69)$$

No entanto, ao se levar em conta a presença da condição de contorno de não-deslizamento na parede, as tensões de cisalhamento na parede foram especificadas usando as funções de parede. Em LAUNDER e SPALDING (1974), é feita uma descrição detalhada das funções de parede, associadas com derivações e discussões sobre as limitações destas.

Assim, as tensões de parede são relacionadas à resultante da velocidade paralela à parede,  $U_w$ , através da fórmula,

$$\tau_w = \frac{\rho |U_w| \left( C_D \frac{1}{2} k^{1/2} \right)^{1/4} K}{\ln(E y^+)} \quad (4.70)$$

onde  $\kappa$ ,  $|U_w|$ ,  $E$  e  $y^+$  são, respectivamente, a constante de von Karman, o valor absoluto do vetor tangencial à parede, a constante de rugosidade e número de Reynolds de parede,  $y^+ = u^* y / \mu$ . A velocidade de cisalhamento  $u^*$  é igual a  $\sqrt{\tau_w / \rho}$ . A constante  $\kappa$  possui um valor próximo a 0.4 enquanto  $E = 9.0$  para paredes lisas.

Considerando o equilíbrio entre a geração e dissipação de energia turbulenta, tem-se as seguintes condições de contorno para  $k$  e  $\varepsilon$  próximo às paredes impermeáveis:

$$y=0, \quad \frac{\partial k}{\partial y} = 0 \quad (4.71)$$

onde  $y$  é a coordenada normal à parede. Tem-se, ainda, para  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon = \frac{C_D \frac{3}{4} k^{\frac{3}{2}}}{K y_1} \quad (4.72)$$

A taxa média de geração e dissipação de energia turbulenta próxima à parede pode ser calculada a partir da seguinte equação (LAUNDER e SPALDING, 1974; AMANO, 1984 *apud* RANADE *et al.* (1989b)):

$$G_w = \frac{\tau_w^2}{\rho y_1 k^{\frac{1}{2}} C_D^{\frac{1}{4}} \kappa} \quad (4.73)$$

$$\varepsilon_w = \frac{C_D k^{3/2}}{\kappa y} \ln \left[ \frac{E y C_D^{1/4} k^{1/2} \rho}{\mu} \right] \quad (4.74)$$

De acordo com RANADE *et al.* (1989b) o uso da condição de contorno de não-deslizamento na parede impermeável parece implicar menor esforço computacional (BUSNAINA e LILLEY, 1984). Deve-se salientar, no entanto, que RANADE *et al.* (1989b), não tentaram utilizar a condição de livre-deslizamento em qualquer parte do tanque, incluindo-se aí a própria superfície da água.

No caso da superfície livre EIGER (1997) propõe que devido às dificuldades físicas impostas pela superfície livre, a escala de comprimento decresce na direção a ela. Portanto, não existe produção de energia cinética turbulenta  $G_K$  na superfície. Assim o gradiente vertical  $dk/dy$  é próximo de zero nas vizinhanças da superfície resultando em

$$C_{\varepsilon_s} = \sqrt{-\frac{C_D^2}{C_\mu} (\sigma_k - \sigma_\varepsilon C_2)} \quad (4.75)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial y} = \sqrt{\frac{\sigma_\varepsilon C_2 - \sigma_k}{C_\mu}} \frac{\varepsilon_s^2}{k_s^{3/2}} \quad (4.76a)$$

A derivação da equação empírica 4.72 é baseada na analogia entre a superfície e uma parede sólida, dando a seguinte equação diferenciada (EIGER, 1997).

$$\frac{\partial \varepsilon_s}{\partial y} = \frac{\kappa}{C_\mu^{3/4}} \frac{\varepsilon_s^2}{k_s^{3/2}} \quad (4.76b)$$

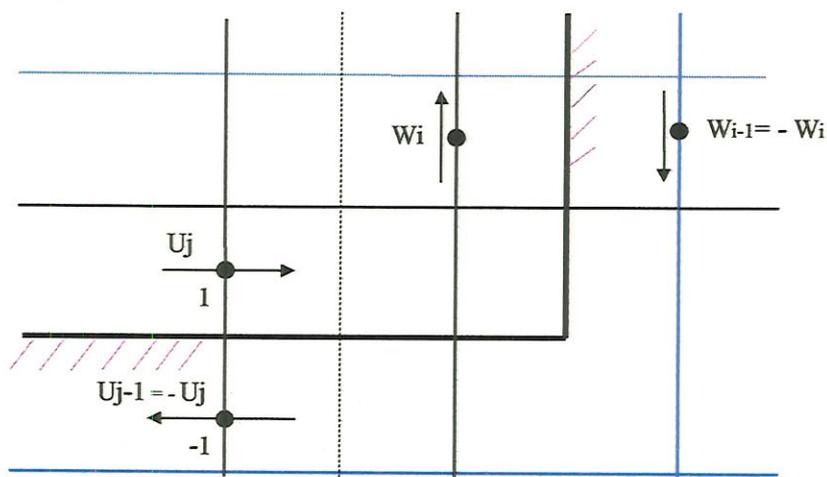
Comparando-se as equações 4.76a e 4.76b, é possível verificar que ambas têm a mesma forma, mas as constantes são diferentes. A condição de contorno derivada para a superfície livre não introduz qualquer constante empírica adicional, pois  $C_{\varepsilon_s}$  é função de constantes já conhecidas (equação 4.75). É bom lembrar que  $y_l$  na equação 4.72, quando se trata da superfície livre é um eixo vertical orientado para o fundo do tanque cuja origem está localizada a  $0,07H$  acima da superfície da água, sendo  $H$  a profundidade da água. Ela foi verificada para o caso de tanques de mistura, no presente trabalho.

#### 4.7.3.1. CONDIÇÕES DE CONTORNO - ASPECTOS NUMÉRICOS

##### *Contorno das Velocidades nas Paredes e Superfície da Água*

O contorno sem deslizamento, “no-slip”, é utilizado geralmente para modelar as interações na superfície de contato entre o fluido e as superfícies sólidas fixas a um referencial inercial (SMITH, 1997, HARVEY e GREAVES, 1982a,b e SOUZA FILHO, 1995). A proposta para obter esta condição é criar um nó virtual  $U_{i-1}$ , e atribuir-lhe o valor simétrico ao ponto da malha alternada mais próxima da parede. Um esquema das velocidades nulas na superfície sólida (paredes e fundo do tanque de mistura), de acordo com a formulação “no-slip” é mostrado na figura 4.6.

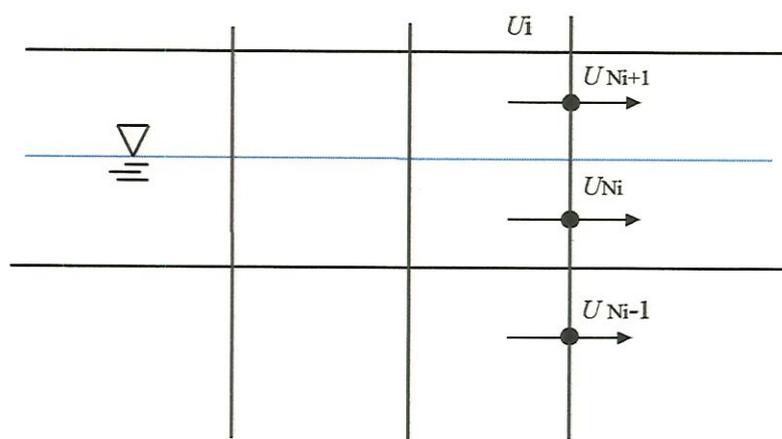
$$U_{j-1} = -U_j \text{ radial}, W_{i-1} = -W_i \text{ axial} \quad (4.77)$$



**Figura 4.6:** Contorno “no-slip” para as direções radial e axial no tanque cilíndrico. Paredes Laterais, Fundo e Eixo da Turbina. Isto é, na coordenada média entre os pontos 1 e -1 a velocidade imposta é zero, tanto na parede de fundo quanto na lateral e eixo da turbina.

No eixo de simetria e na superfície pode-se utilizar a formulação de contorno “free-slip”. A providência a ser tomada agora é criar um nó virtual  $U_{i-1}$ , e atribuir-lhe um valor para a velocidade igual ao do primeiro nó da malha alternada, como indicado na figura (4.7) e descrito pela equação abaixo:

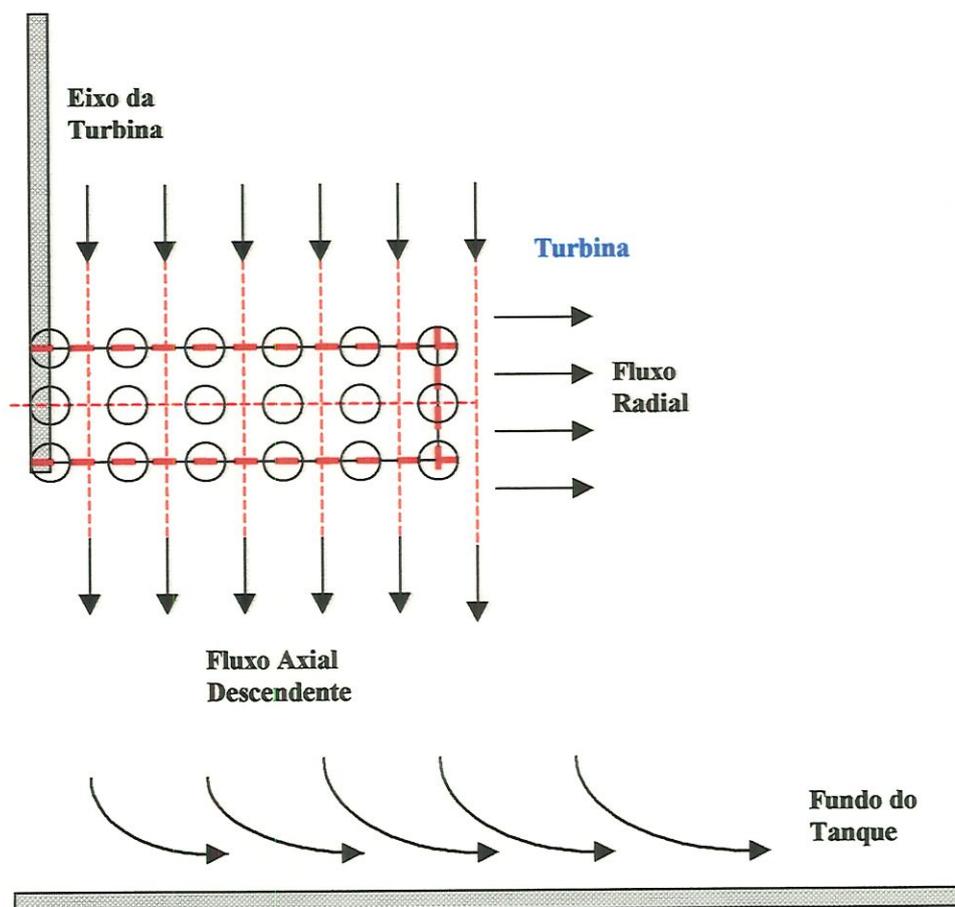
$$U_{j-1} = U_j, \quad (4.78)$$



**Figura 4.7** Contorno “free-slip” para as direções radial e axial no tanque cilíndrico. Superfície e Planos de Simetria (Abaixo da Turbina). Neste caso a velocidade na superfície adquire um valor próximo do valor médio  $(U_{Ni+1}+U_{Ni-1})/2$ .

### Contorno das Velocidades na Turbina

A figura 4.8 mostra esquematicamente o *layout* dos nós da malha para o cálculo do escoamento próximo à turbina. A região interior às hélices não pertence ao domínio de solução. Isto é feito considerando valores de campo arbitrários que são mantidos constantes nestes nós (velocidades conhecidas ao longo do comprimento da turbina, etc). Portanto, as condições de contorno na turbina são o conjunto de pontos, cujas características são mantidas constantes ao longo das iterações.



**Figura 4.8:** Esquema do Contorno da Turbina “no-slip” (móvel) nas direções radial e axial no tanque cilíndrico. Pontos nodais =  $\circ$ , nas faces dos volumes de controle =  $\square$

#### 4.7.4 PROCEDIMENTO NUMÉRICO PARA ELABORAÇÃO DO ALGORITMO TANK.FOR

Um dos procedimentos básicos realizados neste trabalho foi a vetorização do algoritmo, como foi mostrado nas equações 4.63 até 4-67. Tal procedimento foi feito com o fim de economia de memória. Desta forma as equações de cinco pontos (4.41, 4.45, 4.49, 4.53 e 4.57), que foram escritas na forma matricial, tiveram seus índices transformados para uma forma vetorial. A figura 4.9 mostra os índices (I,J) substituídos por P, W, E, N e S. O domínio foi dividido em regiões, as quais envolveram as intersecções de diferentes contornos, como parede-superfície, eixo-superfície, turbina-eixo, turbina-simetria, simetria-parede, canto do fundo; linhas genéricas: onde foram embutidas as funções de parede (lateral e fundo), simetria, eixo da turbina, linhas em torno da turbina e três grandes blocos genéricos: um primeiro localizado na região inferior, um segundo na região próxima à lateral da turbina e um terceiro localizado entre o segundo bloco e a superfície. Na figura 4.9 são apresentados os detalhes da setorização, posicionamento e variação das características da turbina. Na figura 4.10 são apresentados detalhes da malha utilizada, mais notadamente a região da turbina.

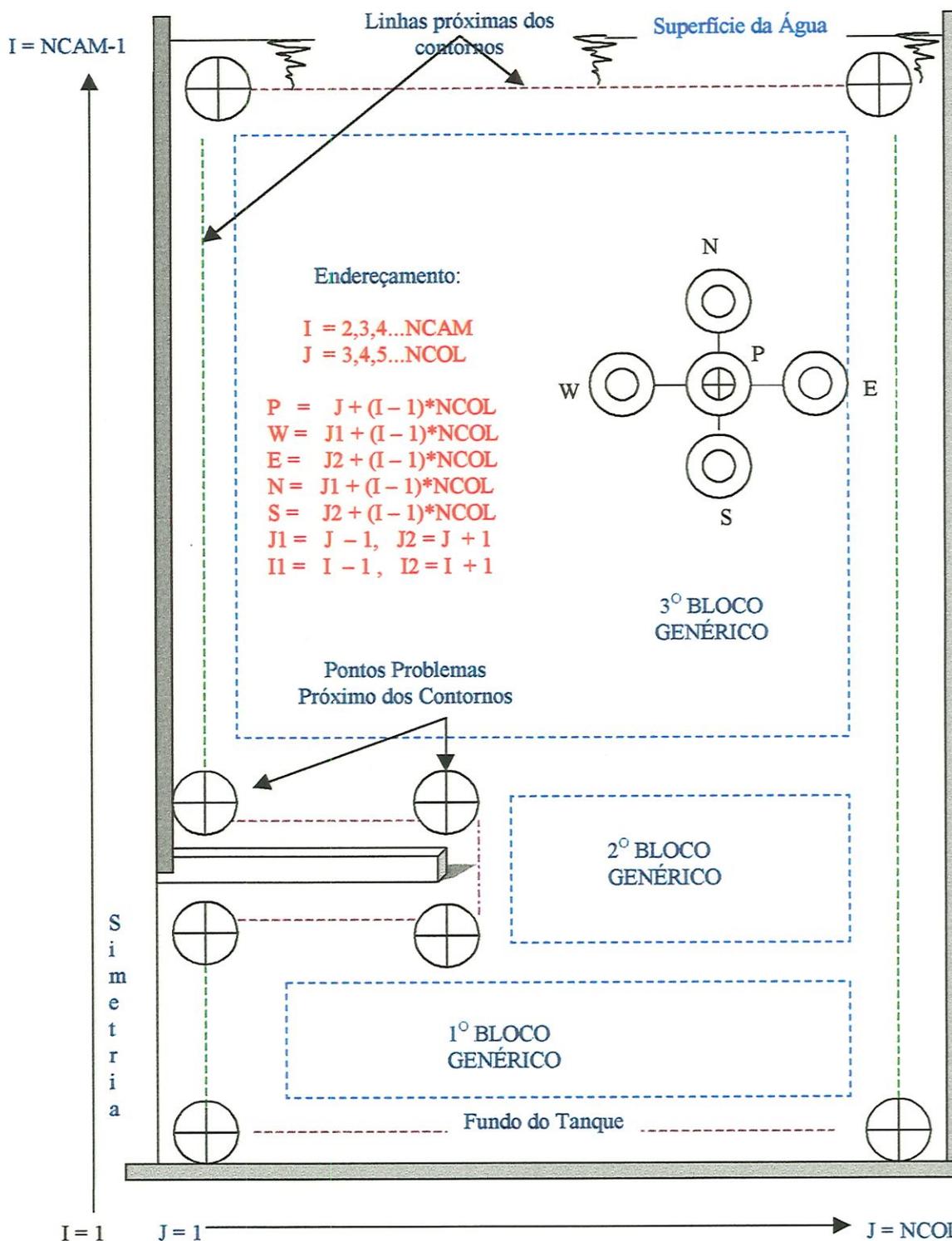
O algoritmo TANK.FOR foi concebido para resolver o escoamento bi-dimensional, apresentando várias sub-rotinas. Dentre estas destaca-se o solucionador para as equações de cinco pontos, denominada de subrotina PENTA. A subrotina PENTA calcula a solução de um sistema de equações lineares (Método Gauss-Seidel - com sub ou sobre-relaxação, discutida no capítulo 3), cuja matriz é uma pentadiagonal com uma banda localizada em qualquer posição do domínio. No caso a localização da banda é definida pelo parâmetro de entrada do algoritmo denominado de NCOL (número de colunas). Esta subrotina apresenta quatro funções principais que são chamadas para resolver os sistemas de equações gerados. Neste caso os valores dos coeficientes da matriz são lidos em sequências: leitura do parâmetro da ordem da matriz,  $N$  (apresentando a seguinte relação:  $N = (NCAM-3)*(NCOL-4)$ ), a posição (endereçamento do início da diagonal principal = NCOL), a precisão (erro) e um parâmetro de relaxação ômega ( $\omega$ ). Em seguida são lidos os coeficientes da diagonal principal, da diagonal da banda acima da diagonal principal, da diagonal abaixo da diagonal principal, da banda variável acima da diagonal principal, da banda variável abaixo da diagonal principal e finalmente a leitura dos termos independentes e valores iniciadores das iterações. Outras subrotinas são apresentadas com um pouco mais de detalhe tabela 4.2.

Tabela 4.2: Subrotinas, funções e especificações do algoritmo TANK.FOR.

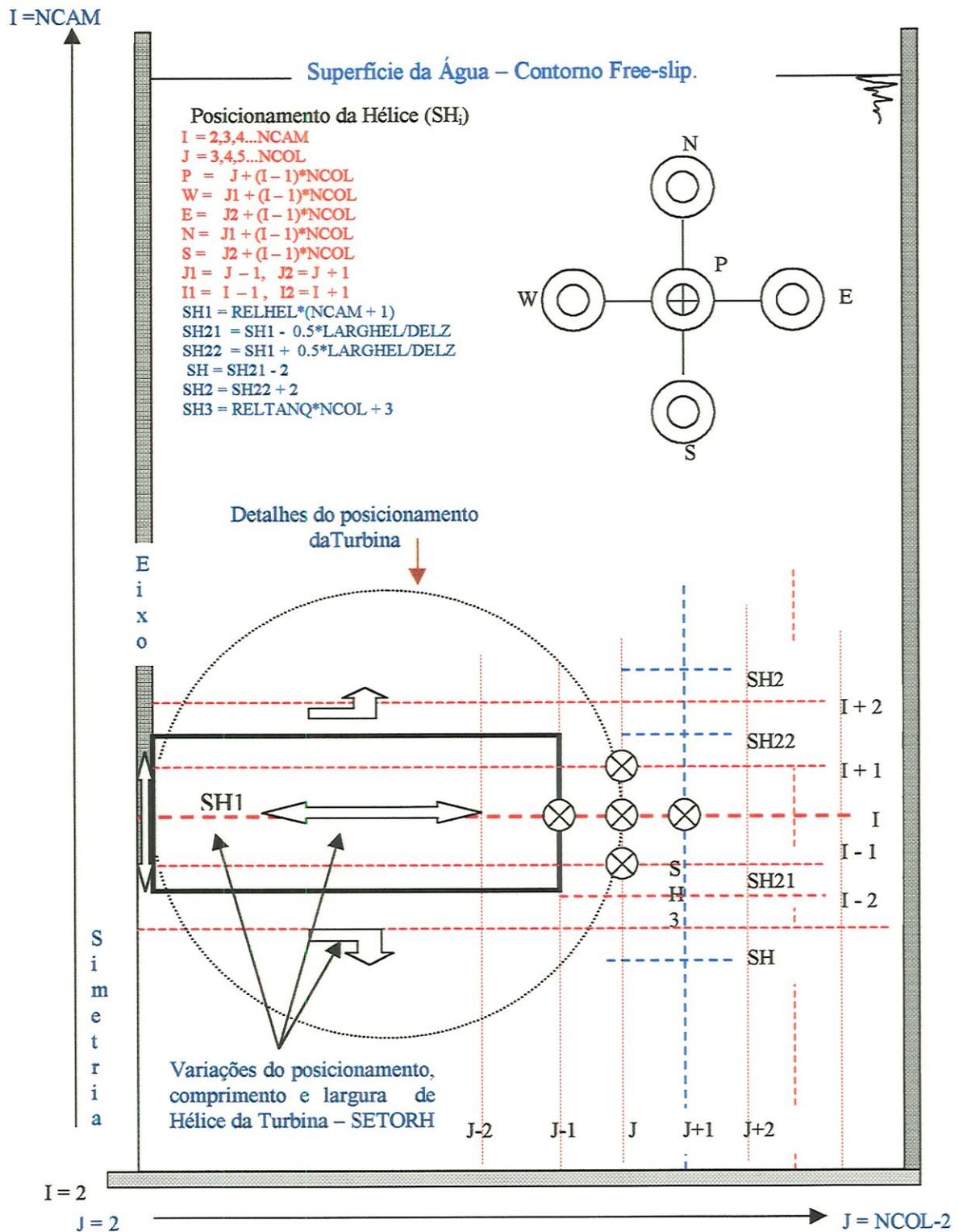
NOME DA SUBROTINA	FUNÇÃO NO ALGORITMO	ESPECIFICAÇÕES
ALGORITMO PRINCIPAL	Gerenciar as demais subrotinas	Lê as subrotinas ENTRADA_GEOMETRIA, TESTE_GEOMETRIA, GRID e alguns parâmetros do modelo $k-\epsilon$ . Controla os arquivos de saída da maioria das subrotinas. Estipula a ordem da matriz pentadiagonal em função de NCAM e NCOL e a posição da banda esparsa.
ENTRADA_GEOMETRIA	Gerencia os dados geométricos e autor estudado.	Lê o autor estudado. (CUNHA 1993, MOMESSO 1996, ou HSIEH <i>et al</i> 1993). Estipula variáveis geométricas importantes: RELHEL, RELARG, RELTANQ, COMPTANQ, LARGTANQ, DH, H.
TESTE_GEOMETRIA	Condiciona a geometria em ENTRADA_GEOMETRIA.	Verifica os dados geométricos da subrotina TESTE_GEOMETRIA. Analisa os padrões construtivos do tanque. O item principal é o referente ao número de nós ou pontos mínimos na lateral da turbina.
DAB.Dat	Arquivos de dados.	Dados e especificações experimentais de CUNHA (1993).
MOMESSO.Dat	Arquivos de dados.	Dados e especificações experimentais de MOMESSO (1996).
HSIEH.Dat	Arquivos de dados.	Dados e especificações experimentais de HSIEH <i>et al</i> (1993) <sup>33</sup> .
GRID	Setoriza pontos da malha por partes	Determina a localização geral de todos os pontos do domínio: localizados em contornos, cantos, turbina, paredes, superfície, simetria e eixo.
ENDER_SIMPLES	Endereçamento de pontos genéricos	Endereçamento de qualquer ponto do domínio, na forma vetorizada.
ENDERACAMENTO	Endereçamento especial.	Endereçamento especial que leva em conta o posicionamento e o setor da turbina, na forma vetorizada. Movimenta-se sobre o domínio.
TRANS_MASSA	Gerencia todas as subrotinas relacionadas com a transferência de massa.	Analisa qual autor está sendo estudado e lê parâmetros necessários para o cálculo de grandezas físicas e físico-químicas específicas, como T0, GAS, MT, XB, MB, VEL, H, DH, VEL, KLMAX, faixa de rotação, faixa de temperatura e número de experimentos. Com esses dados são chamadas as subrotinas TYN e DIF, <i>via</i> leitura de arquivos de dados (DAT).
TYN	Subrotina simples	Usa o método de Tyn e Callus para calcular os Volumes de ponto de bolha em função dos volumes críticos dos gases.
DIF	Subrotina para calcular $D_{AB}$ e os adimensionais ( $m^*$ e $x^*_{min}$ ) do modelo de SCHULZ <i>et al.</i> (1991, 1992).	Calcula as difusividades moleculares para todos os gases em questão, levando em conta qualquer passo de variação de temperatura pré-estipulado, bem como as variações de massa específica e viscosidade dinâmica em função destas temperaturas. Determina a concentração de saturação para o oxigênio (para pressões $\cong 1$ atm). Esta subrotina também chama as subrotinas MASTER e XASTER.
MASTER	Subrotina simples	Lê as velocidades da turbina e alguns parâmetros físicos para calcular os parâmetros adimensionais $m^*$ de SCHULZ <i>et al.</i> (1991,1992).
XASTER	Subrotina simples	Lê as difusividades dos gases e alguns parâmetros físicos para calcular os parâmetros adimensionais $x^*_{min}$ de SCHULZ <i>et al.</i> (1991,1992).
VEL_Angular	Subrotina simples	Lê independentemente as velocidades angulares de cada experimento.
CONDIÇÕES_INICIAIS	Comanda toda as operações das condições iniciais e de contorno do algoritmo	Estipula as velocidades em cada ponto da turbina e nos demais pontos do domínio referentes ao escoamento. Faz parte desta subrotina toda a setorização e manipulação de velocidades nos pontos geométricos da turbina (largura, comprimento, posicionamento, etc), ou seja, se o diâmetro ou a largura aumentarem irá existir proporcionalmente um aumento no número de pontos que estarão incluídos dentro da turbina. (aumento do número de pontos nos contornos da turbina).
COEF_Ue	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes da matriz de cinco pontos de $U_e$ para o setor a leste do ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_Uw	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos de $U_w$ no setor a oeste do ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_Wn	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos de $W_n$ no setor norte do ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_Ws	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos de $W_s$ para o setor a sul do ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_PRES	Subrotina de cálculo	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos para a pressão P no

<sup>33</sup> Qualquer outro experimento que for adicionado, dependerá unicamente de um arquivo com as condições geométricas, físicas como temperatura, número de rotações, gás, etc. O Algoritmo TANK.FOR prevê isso.

	de coeficientes	ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_KCIN	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos para a energia $k$ no ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_EPS	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos para $\varepsilon$ no ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
COEF_CONC	Subrotina de cálculo de coeficientes	Calcula os coeficientes para a matriz de cinco pontos para concentração $C$ no ponto P em questão. Interpolação: Esquema da lei de Potência.
FONTE_Ue	Subrotina de cálculo dos termos independentes	Calcula os termos independentes $S_C^\Phi$ , parte constante e multiplicativa (que soma o coeficiente da diagonal principal) do termo fonte de $U_e$ .
FONTE_Uw	Subrotina de cálculo dos termos independentes	Calcula os termos independentes $S_C^\Phi$ , parte constante e multiplicativa (que soma o coeficiente da diagonal principal) do termo fonte de $U_w$ .
FONTE_Wn	Subrotina de cálculo dos termos independentes	Calcula os termos independentes $S_C^\Phi$ , parte constante e multiplicativa (que soma o coeficiente da diagonal principal) do termo fonte de $W_n$ .
FONTE_Ws	Subrotina de cálculo dos termos independentes	Calcula os termos independentes $S_C^\Phi$ , parte constante e multiplicativa (que soma o coeficiente da diagonal principal) do termo fonte de $W_s$ .
MASSA_ADIM	Subrotina de cálculo	Os campos de velocidades na superfície são incorporados nos modelos de transferência de massa para tentar reproduzir os resultados experimentais obtidos da literatura
CONTORNO_ESCALAR	Subrotina de cálculo	Avalia a concentração nas células da superfície livre com concentração zero (traçadores) ou igual a concentração de saturação (oxigênio).
FREE_SLIP	Subrotina simples	Condições de contorno de livre deslizamento (free-slip)
NO_SLIP	Subrotina simples	Condições de contorno de não deslizamento (no-slip)
HEL_SUPERIOR	Subrotina simples	Condições de contorno da parte superior da turbina
HEL_INFERIOR	Subrotina simples	Condições de contorno da parte inferior da turbina
HEL_LATERAL	Subrotina simples	Condições de contorno da parte lateral da turbina
SIMETRIA	Subrotina simples	Condições de contorno no eixo de simetria.
EIXO_TURBINA	Subrotina simples	Condições de contorno no eixo físico da turbina.
SUPERFICIE_LIVRE	Subrotina simples	Condições de contorno na superfície livre.
PAREDE_FUNDO	Subrotina simples	Condições de contorno no fundo do tanque.
PAREDE_LATERAL	Subrotina simples	Condições de contorno na parede lateral do tanque.
PERFIL_LOG	Subrotina de cálculo	Determina as velocidades próximas das superfícies sólidas (perfil logaritmo de velocidades e funções de parede).
CONTINUIDADE_Cp_a	Subrotina de cálculo	Faz o balanço de massa dentro do volume de controle especificado ( $C_p$ na primeira iteração).
CONTINUIDADE_Cp_L	Subrotina de cálculo	Faz o balanço de massa dentro do volume de controle especificado ( $C_p$ na segunda iteração).
SIMPLER	Subrotina de cálculo	Realiza o procedimento SIMPLER
POISSON	Subrotina de cálculo	Executa o procedimento onde a equação da continuidade é utilizada para o cálculo direto da pressão.
CORPRES	Subrotina de cálculo	Corrige as pressões obtidas das iterações anteriores (SIMPLER).
CORVEL	Subrotina de cálculo	Corrige as velocidades obtidas das iterações anteriores (SIMPLER).
FUNCAO1	Subrotina de cálculo	Função que está relacionada com os coeficientes sul na subrotina penta.
FUNCAO2	Subrotina de cálculo	É uma função que está relacionada com os coeficientes oeste na subrotina penta.
FUNCAO3	Subrotina de cálculo	Função que está relacionada com os coeficientes leste na subrotina penta.
FUNCAO4	Subrotina de cálculo	Função que está relacionada com os coeficientes norte na subrotina penta.
PENTA	Subrotina de cálculo	É o solucionador de todos os processos iterativos. É o centro de todos os cálculos para alcançar as soluções.



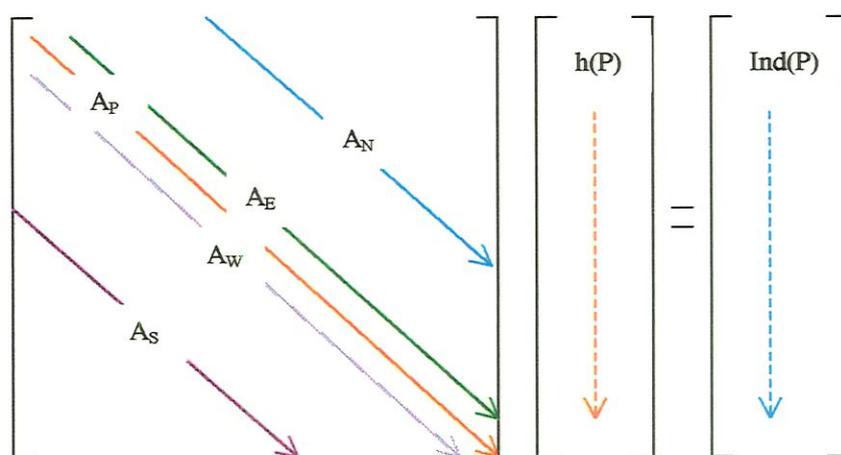
**Figura 4.9:** Divisão do domínio de integração em várias regiões do Tanque de Agitação. Forma de endereçamento. Observe que NCOL e NCAM representam o número de colunas e camadas (linhas) do domínio computacional. Por conveniência esses parâmetros também cobrem alguns pontos fora do tanque para facilitar o endereçamento e acoplamento das condições de contorno.



**Figura 4.10:** Detalhes da Malha de Integração do tanque de agitação e célula computacional. Pontos dentro do domínio físico, inclusive a simetria, setorização, posicionamento e variação das características geométricas da turbina (fora de escala e ampliada para ver detalhes). A sub-rotina ENDERECAMENTO controla a movimentação e variações geométricas da turbina.

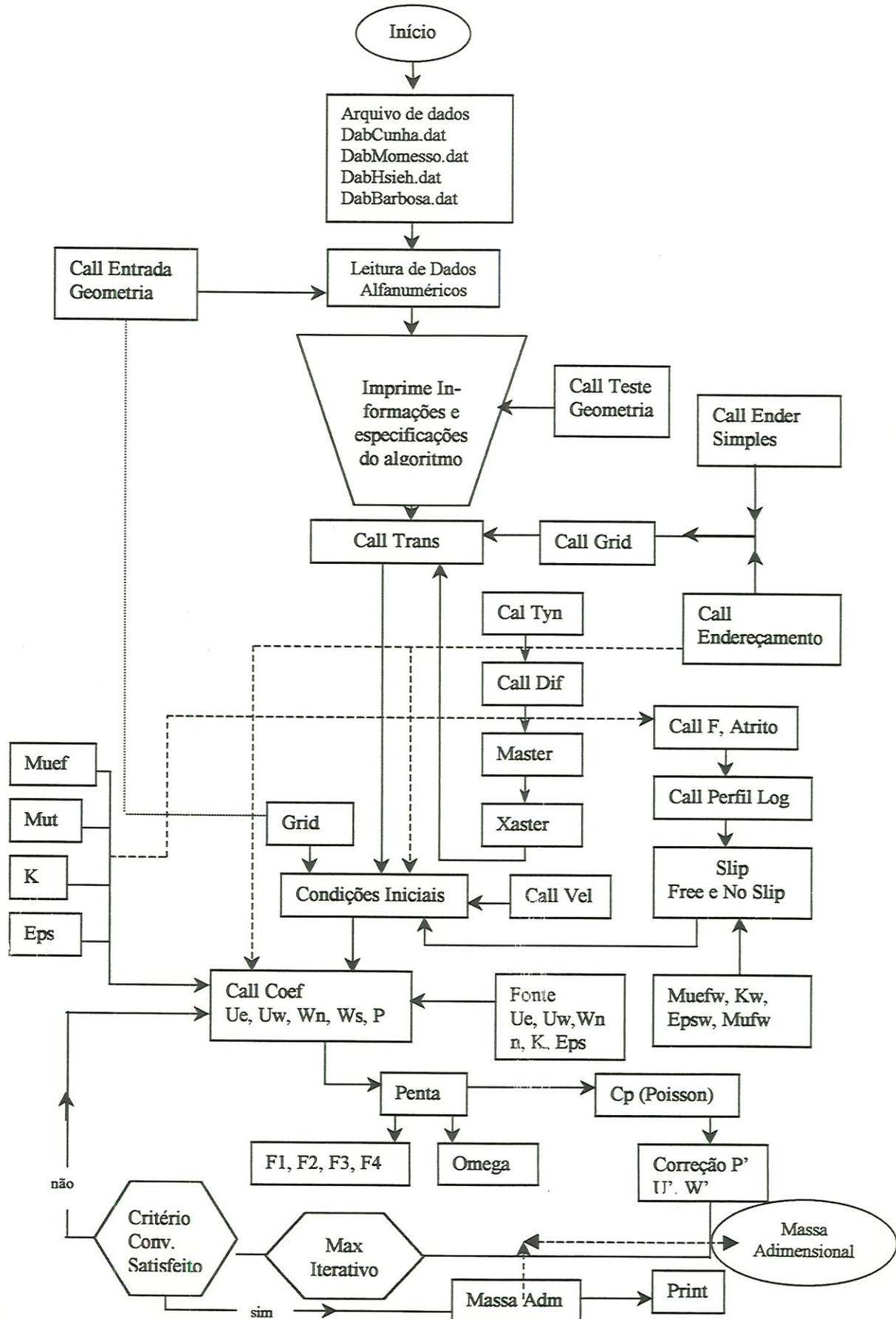
Para os pontos P adjacentes ao contorno esquerdo,  $A_W = 0$  (somente no eixo físico da turbina), ao contorno direito,  $A_E = 0$  (parede lateral do tanque), à fronteira interior,  $A_S = 0$  (no fundo do tanque), e à fronteira superior  $A_N = 0$  (superfície livre – quando for considerado no-slip). A figura 4.11 mostra a estrutura da matriz pentadiagonal. A fórmula de cinco pontos em torno do ponto  $P(i,j)$  típica do programa TANK.FOR, como já foi dito, é dada pela equação  $A_P^\phi \Phi_P = A_E^\phi \Phi_E + A_W^\phi \Phi_W + A_N^\phi \Phi_N + A_S^\phi \Phi_S + C_P$  e  $A_E$ ,  $A_W$ ,  $A_N$  e  $A_S$  são coeficientes dados.  $C_P$  é o termo fonte e  $A_P^\phi = A_E^\phi + A_W^\phi + A_N^\phi + A_S^\phi$ . Os índices referem-se aos cinco pontos genéricos.

De acordo com a equação de cinco pontos, o coeficiente da diagonal principal é igual ao somatório dos coeficientes das diagonais adjacentes (próximos e esparsos) da matriz. E para que se tenha dominância na diagonal principal é necessário em alguns casos que a condição seja relaxada. Ou seja, que a diagonal se torne maior ou igual a soma dos coeficientes dos pontos vizinhos.  $h(P)$  e  $\text{Ind}(P)$  são denominados, respectivamente, como o vetor solução e o termo independente do sistema:



**Figura 4.11:** Estrutura matricial das equações aplicada à malha bidimensional. O ordenamento dos pontos inicia-se no primeiro ponto inferior esquerdo do domínio, ou seja, na segunda coluna e terceira linha (ponto número 69, no endereçamento vetorial, quando, por exemplo, a malha apresenta 33 x 63 pontos). As outras diagonais não referidas são todas iguais a zero. Esse esquema possibilita economia de memória. O sistema de equações também apresenta-se com os coeficientes armazenados na forma de vetores (subrotina PENTA).

Figura – 4.12: Fluxograma do Algoritmo Principal



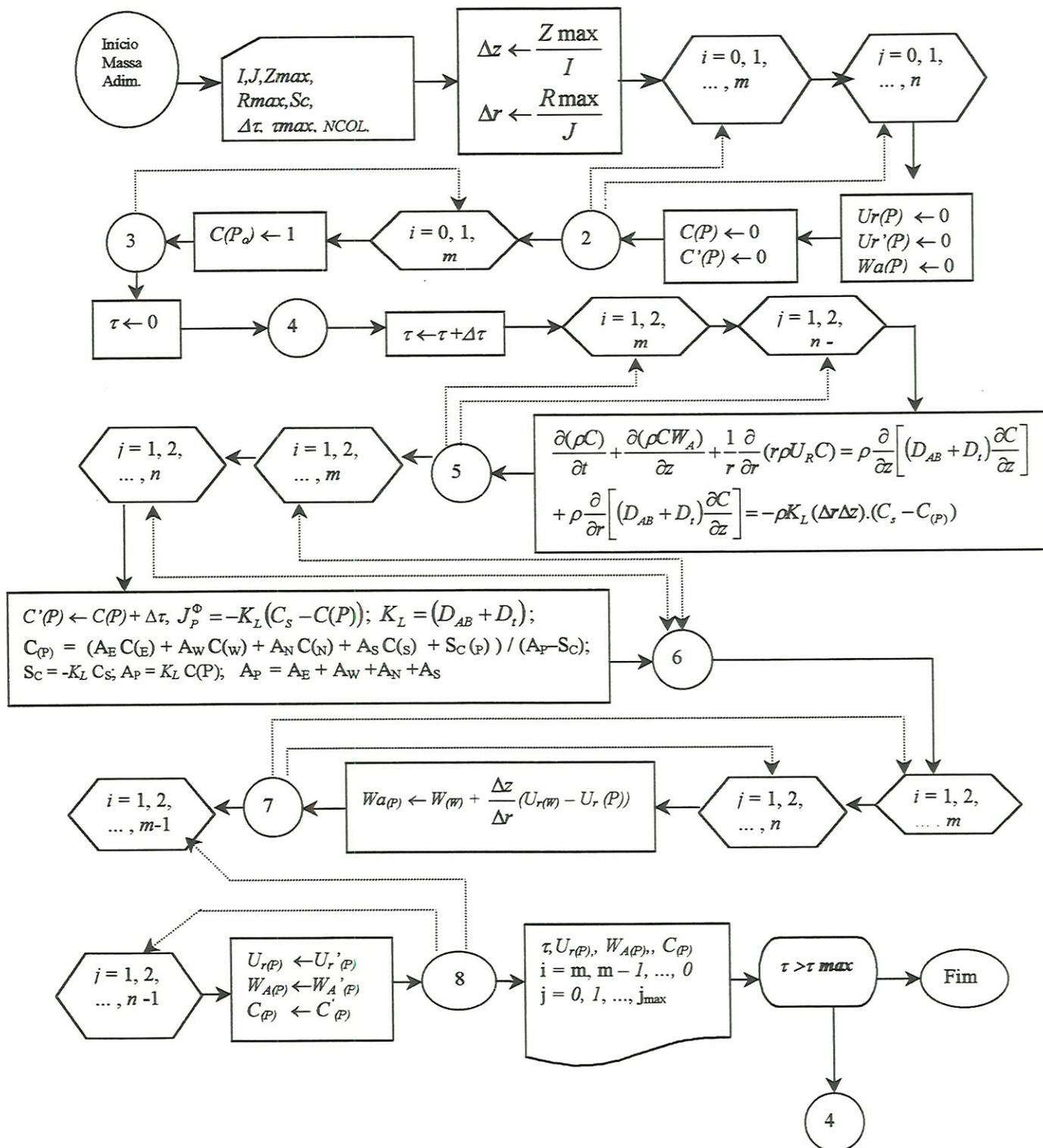


Figura - 4.13: Fluxograma da Subrotina Concentração Adimensional.

#### 4.8 COMENTÁRIOS ACERCA DA METODOLOGIA

Como pode ser percebido, neste capítulo fez-se referências a resultados e métodos coletados da literatura da área. Este procedimento foi seguido porque a construção do presente código numérico forçosamente utilizou os caminhos mais adequados já testados. Também foi enfatizado que, para a região de superfície livre foram utilizados contornos mais vinculados à realidade física. Neste ponto, o código desenvolvido envolveu alguma modificação substancial em relação aqueles existentes.

Em resposta à pergunta acerca do eventual uso de um código já existente (comercial), é preciso frisar que as modificações que seriam introduzidas podem implicar em modificações estruturais do programa, o que é muito mais fácil de implementar em um sobre o qual se tem pleno domínio. Assim, o desenvolvimento de um novo código, vinculado às necessidades específicas da pesquisa em questão, é desejável. Foi utilizado um computador pessoal pentium (64 MB – 166 MHz) em todos os cálculos, tanto em malhas grossas quanto com malhas mais finas.

O tempo de processamento nas simulações foi de aproximadamente 3-6 horas. Tamanho da célula –  $\Delta z$  5 mm ou menor e  $\Delta r$  10 mm ou menor. Número de linhas entre 63 e 106 e número de colunas entre 15–33. Totalizando o número de pontos da matriz entre 1740 e 1990.

Alguns programas como EXCEL da Microsoft (1997), ORIGIN (Versão – 4.1), WINSURF (Versão 5.0) da Golden Software, Inc. (1993-94), VVIEW (Versão 1.97) da PUC/Rio (1995) foram utilizados para gerar as saídas gráficas.

---

## V – RESULTADOS DO ALGORITMO COMPUTACIONAL

### 5.1 EXIGÊNCIAS DO ALGORITMO

Muitos algoritmos computacionais têm sido utilizados com o intuito de simular o escoamento em tanques: como o FIAT, FLUENT, TEACH-C, PHOENIX, FLOW3D, MIXFLO, FLUFIX e STAR e outros. Entretanto, eles apresentam complexidade bastante elevada e alto custo para uso geral e não são facilmente adquiridos. Além disso, as hipóteses e as informações empíricas inerentes aos algoritmos, tornam-se difíceis de garantir que a resposta obtida corresponda a uma solução para um problema não-trivial. Neste sentido, o desenvolvimento de algoritmos específicos ainda é necessário. No presente caso, o estudo da superfície é um exemplo que se insere neste contexto.

Discutiu-se qual seria o procedimento e propriedades que tais algoritmos deveriam possuir. Foram também explicadas as razões pelas quais optou-se em elaborar um algoritmo particular, com o intuito de simular as trocas de gases na superfície ar-água.

A revisão sobre experimentos e simulação em tanques de mistura apontam para uma gama enorme de pontos de vista sobre o tema. Mesmo as inovações numéricas indicadas pelas referências mais atuais sobre o assunto apresentam muitas limitações do ponto de vista dos dados experimentais comparativos com as simulações, seja no sentido da abordagem das condições de contorno, bem como do ponto de vista das limitações dos métodos computacionais. Algumas referências citam a necessidade de trabalhar com escoamentos tri-dimensionais. Outros sugerem que as simulações bi-dimensionais são suficientes para simular os escoamentos para as aplicações em engenharia. Algumas referências não se preocupam com os detalhes da turbina em si. Mas outras a tratam como assunto principal, dependendo dos objetivos. Portanto, se levarmos em conta as dificuldades inerentes aos escoamentos em tanques de mistura, teremos também que nos confrontar com os problemas inerentes aos processos de troca de massa na superfície, que em nenhum momento da revisão foi mostrada a abordagem adequada para o tema de interesse para este trabalho. Entretanto, como já foi discutido anteriormente, todas as referências foram úteis, quando utilizamos destes referidos textos uma ou outra abordagem de interesse

para o presente trabalho, principalmente aquelas mais comumente utilizadas condições de contorno: parede, simetria, contorno da turbina, etc.

No presente estudo foi feito o zoneamento de zonas específicas do domínio do sistema. Estas regiões foram definidas em torno da turbina do tanque, simetria, paredes, eixo e superfícies do líquido. Assim, tais volumes foram caracterizados diferentemente no domínio computacional. Procedimento este que diminuiu as dificuldades na formulação do problema do escoamento turbulento e da sua implementação. Um exemplo disso foi o ponto abaixo do impulsor rotativo, na direção do eixo de simetria. Outro exemplo foi a manipulação das características geométricas do impulsor.

Considerando todos esses fatores, listou-se abaixo algumas das justificativas para a elaboração do algoritmo TANK.FOR.

- i) **Especificidade do tema:** o intuito do algoritmo foi fazer uma abordagem numérica específica sobre as questões de troca gasosa na superfície. Portanto, não foi objetivo do trabalho criar um código computacional genérico. O algoritmo foi produzido para simular escoamento em coordenadas cilíndricas, com propriedades uniformes dos escoamentos, recirculação, sem reação química, e várias formas de condição de contorno.
- ii) **Aplicabilidade:** o algoritmo não foi escrito com a preocupação de ser didático, no seu entendimento ou leitura. Entretanto, procurou-se descrever em linhas de comentários detalhes explicativos sobre os procedimentos em questão que foram considerados imprescindíveis ao entendimento do mesmo. O algoritmo tem propriedades específicas somente para os tanques de mistura com geometria cilíndrica. As possibilidades geométricas genéricas permitem uma “livre” escolha do posicionamento da turbina. Por exemplo, a  $1/4$ ,  $1/3$  de  $H$  (altura do tanque), ou qualquer outra posição entre a superfície do líquido e o fundo do tanque. Da mesma forma o algoritmo permite que a turbina possa ser aumentada ou diminuída em seu comprimento, entre um valor de 20% do raio do tanque e o raio do mesmo. Semelhantemente, a largura da turbina pode ser aumentada ou diminuída, respeitando-se as dimensões da altura do tanque. De qualquer forma foram tomadas providências, por meio da subrotina TESTE\_GEOMETRIA, para

“controlar” entradas de dados no algoritmo e avaliar se tal escolha seria ou não possível, dentro dos padrões construtivos dos tanques normalmente utilizados, uma vez que eles possuem características geométricas que respeitam regras específicas.

- iii) **Economia:** o ideal seria construir um algoritmo que demandasse o mínimo de memória computacional e espaço para armazenamento de dados no computador. Como não existe um algoritmo ideal que atenda à todas essas necessidades, buscou-se tanto quanto possível elaborar um com economia de memória, com a vetorização do domínio. Ou seja, trabalhou-se com a forma vetorizada da matriz de cinco pontos.

## 5.2 ESCOPO E LIMITAÇÕES DO ALGORITMO COMPUTACIONAL TANK.FOR

O algoritmo computacional, em princípio, apresentou o escopo e limitações semelhantes àquelas do procedimento de solução. Por exemplo, como no caso das características geométricas da turbina, os comandos do algoritmo requeridos, para modificá-las, são poucos e localizados na subrotina ENTRADA\_GEOMETRIA. Como também já foi mencionado, o algoritmo não permite a mudança para outros sistemas de coordenadas. Nesse aspecto ele é rígido. Sempre que possível, foi feita uma listagem das principais variáveis envolvidas em cada subrotina, a fim de facilitar sua descrição.

Como foi mostrado nas figuras 4.3a e 4.3b o domínio foi subdividido em *pontos*, *linhas* e *blocos* específicos, com o objetivo de proporcionar praticidade, como por exemplo, linhas e pontos na coluna de simetria, pontos e linhas da superfície, paredes e turbina. Assim, quando forem necessárias modificações em partes específicas, dentro do algoritmo principal e das subrotinas, não haverá interferência nos demais pontos do domínio, tornando-os mais facilmente manipuláveis.

## 5.3 DETALHES DO ALGORITMO COMPUTACIONAL TANK.FOR

### 5.3.1 PRINCÍPIOS DA ORGANIZAÇÃO

a) **Função do Algoritmo:** o algoritmo foi projetado para atender algumas exigências básicas como: a solução das equações algébricas serem próximas das soluções das equações diferenciais (deduzida das equações diferenciais do capítulo 3); suficiência de informações para o cálculo, de uma variável particular,  $\Phi$ , em cujas quantidades surgem os coeficientes e termos fontes da fórmula geral. Especificação de constantes numéricas e nós das malhas; as equações algébricas foram resolvidas por um procedimento iterativo. Cálculo de várias quantidades de interesse que não são requeridas no processo iterativo, como por exemplo, a distribuição das velocidades.

b) **Características Principais do Algoritmo:** nesta seção foram mostradas as sequências de operação, e a interconexão das várias partes do algoritmo, e suas funções, de forma resumida.

- i) **A inicialização do Algoritmo:** é controlada por várias subrotinas: ENTRADA\_GEOMETRIA (controla o número de colunas e número de linhas do domínio, controla as dimensões da turbina: largura, comprimento, posicionamento do centro da turbina, etc; TESTE\_GEOMETRIA (especifica a largura ou comprimento máximos ou mínimos da turbina dentro do tanque e condições mínimas aceitáveis para um tanque padrão; ENDERECAMENTO (ENDER\_SIMPLES) (são as subrotinas chave que transformam o endereçamento na forma matricial (apresentada no domínio físico) para a forma vetorial; TEMPERATURA (são as temperaturas padrão em que geralmente são feitos os experimentos em tanques encontrados na literatura), VEL\_ANGULAR (são as rotações ou velocidades angulares experimentais realizados em testes de mistura); VEL\_INICIAIS e SLIP (são as velocidades de partida para o procedimento do método SIMPLER).
- ii) **A definição dos pontos no domínio:** imprime e armazena na memória a localização dos pontos no domínio da malha: GRID (feita de acordo com sub-divisão do domínio mostrado na figura 4.10. Nesta subrotina a subrotina ENDERECAMENTO é chamada para cada ponto, linha ou bloco em questão, dependendo da região do tanque).

- iii) **As condições iniciais:** para geração dos coeficientes das matrizes (campos de velocidade e pressão), dentro do processo iterativo foi utilizada a subrotina VEL\_INICIAIS. As maiores dificuldades encontradas nesta subrotina foram em decorrência da definição das velocidades no interior e fronteiras da turbina. Esta subrotina chama a VEL\_ANGULAR.
- iv) **Contornos:** as subrotinas dos contornos foram construídas com o objetivo facilitar a entrada das funções de parede (no-slip) e os contornos de simetria (espelho) e de superfície (no-slip ou free-slip). Dentre esses estavam também os contornos de todos os pontos na superfície da turbina e pontos interiores a ela. Tais subrotinas são: PAREDE\_FUNDO, PAREDE\_LATERAL, SIMETRIA, HEL\_SUPERIOR, HEL\_LATERAL, HEL\_INFERIOR, EIXO\_TURBINA e SUPERFÍCIE\_LIVRE, NO-SLIP, FREE-SLIP e PERFIL\_LOG.
- v) **Coefficientes:** para o cálculo dos coeficientes das matrizes de cinco pontos foram utilizadas as subrotinas COEF\_Ue, COEF\_Uw, COEF\_Wn e COEF\_Ws, COEF\_PRES, COEF\_KCIN, COEF\_EPS e COEF\_CONC. Essas subrotinas apresentam áreas comuns com praticamente todas as outras subrotinas anteriormente descritas. Elas determinam os coeficientes, calculam seus respectivos termos fontes (para todos os volumes de controle). Todas elas chamam a subrotina PENTA.

c) **Controle das sequências dos cálculos e saída para impressão:** na figura 5.1 está apresentada uma saída para o campo de velocidade esperado em uma simulação no algoritmo TANK.FOR. Indicam-se as setas de velocidades dentro do domínio físico do tanque de mistura. O comportamento do escoamento na superfície (componentes de velocidade radiais) foram incorporados pelo modelo de transferência (SCHULZ *et al.*, 1991, 1992). Os valores de  $U$  na superfície foram substituídos pelo parâmetro  $a$ , do modelo de transferência de SCHULZ *et al.*, (1991, 1992) a fim de comparar com os valores experimentais calculados pela subrotina XASTER. A subrotina XASTER chama as subrotinas TYN, DIF, TEMPERATURA, VELOC. Além disso, esta subrotina faz as leituras das velocidades angulares (rotações das turbinas e temperaturas de teste experimentais), calcula todos os parâmetros adimensionais do modelo de transferência e os armazena para comparar com os valores resultantes da simulação. Campo de velocidades iniciais.

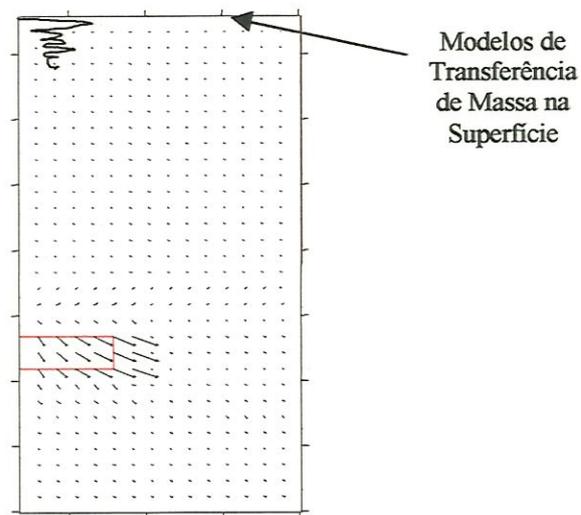


Figura 5.1: Tanque de mistura – Campo de Velocidades Iniciais.

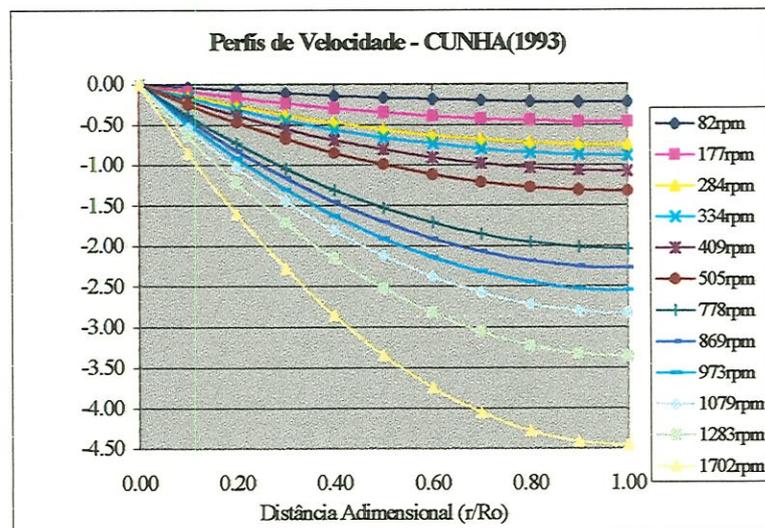


Figura 5.2a: Perfis de Velocidades Iniciais (Parabólico) – CUNHA (1993).

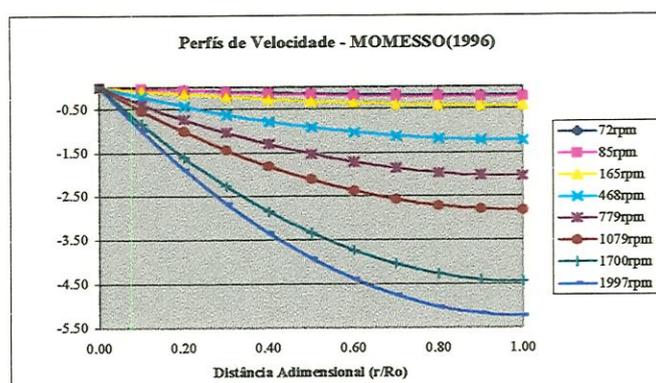


Figura 5.2b: Perfis de Velocidades Iniciais (Parabólico) – MOMESSO (1996).

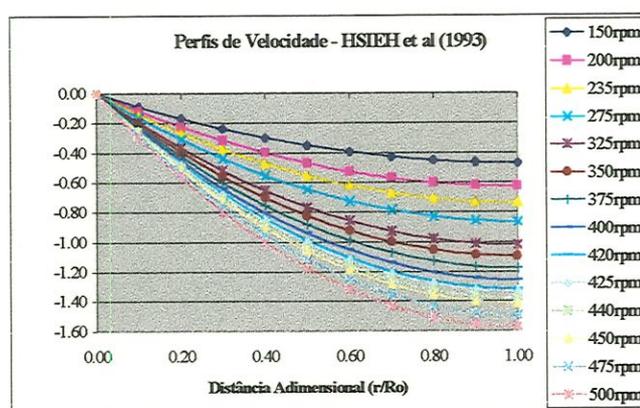


Figura 5.2c: Perfis de Velocidades Iniciais (Parabólico) – HSIEH et al (1993).

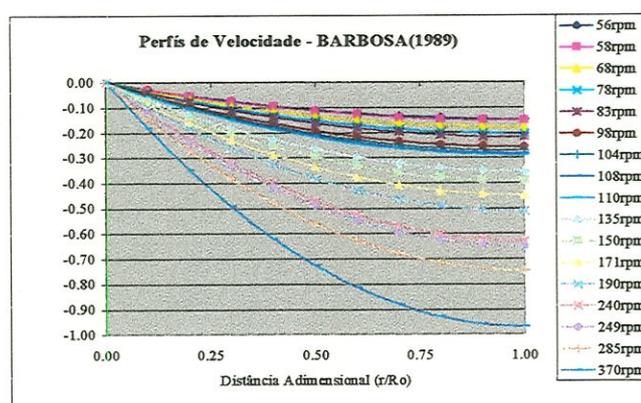


Figura 5.2d: Perfis de Velocidades Iniciais (Parabólico) – BARBOSA (1989).

As condições geométricas do tanque (número de colunas (NCOL) e número de linhas (NCAM), comprimento físico do tanque e largura física do tanque (parâmetros de entrada) são gerados pelas subrotinas ENDEREÇAMENTO, ENDER\_SIMPLES, GRID e TESTE\_GEOMETRIA. Entenda-se este gerado como o conhecimento numérico dos limites do problema. RELHEL é a relação entre as dimensões da turbina e largura do tanque. RELARG é a relação entre a largura da turbina e seu comprimento. RELTANQ é um parâmetro que indica em que posição do eixo axial do tanque está localizada a turbina. LARGTANQ é igual a largura física do tanque e COMPTANQ é igual ao comprimento físico do tanque (saída da subrotina – TANK.OUT).

RELHEL = .3333  
 RELARG = .1000  
 RELTANQ = .333  
 COMPTANQ = 30.000  
 LARGTANQ = 15.000  
 NCOL = 33  
 NCAM = 63

\*\*\* LOCALIZACAO DOS PONTOS P, E, W, N e S \*\*\*

PRIMEIRO PONTO

P( 3, 2)= 68 W( 3, 2)= 67 E( 3, 2)= 69 N( 3, 2)= 101 S( 3, 2)= 35

SEGUNDO PONTO (primeiro ponto do fundo, parte inferior do eixo de simetria)

P( 3, 3)= 69 W( 3, 3)= 68 E( 3, 3)= 70 N( 3, 3)= 102 S( 3, 3)= 36

PRIMEIRA LINHA INFERIOR GENÉRICA DO FUNDO (linha do fundo do tanque)

P( 3, 4)= 70 W( 3, 4)= 69 E( 3, 4)= 71 N( 3, 4)= 103 S( 3, 4)= 37  
 P( 3, 5)= 71 W( 3, 5)= 70 E( 3, 5)= 72 N( 3, 5)= 104 S( 3, 5)= 38  
 P( 3, 6)= 72 W( 3, 6)= 71 E( 3, 6)= 73 N( 3, 6)= 105 S( 3, 6)= 39  
 P( 3, 7)= 73 W( 3, 7)= 72 E( 3, 7)= 74 N( 3, 7)= 106 S( 3, 7)= 40  
 P( 3, 8)= 74 W( 3, 8)= 73 E( 3, 8)= 75 N( 3, 8)= 107 S( 3, 8)= 41  
 P( 3, 9)= 75 W( 3, 9)= 74 E( 3, 9)= 76 N( 3, 9)= 108 S( 3, 9)= 42  
 P( 3, 10)= 76 W( 3, 10)= 75 E( 3, 10)= 77 N( 3, 10)= 109 S( 3, 10)= 43  
 P( 3, 11)= 77 W( 3, 11)= 76 E( 3, 11)= 78 N( 3, 11)= 110 S( 3, 11)= 44  
 P( 3, 12)= 78 W( 3, 12)= 77 E( 3, 12)= 79 N( 3, 12)= 111 S( 3, 12)= 45  
 P( 3, 13)= 79 W( 3, 13)= 78 E( 3, 13)= 80 N( 3, 13)= 112 S( 3, 13)= 46  
 P( 3, 14)= 80 W( 3, 14)= 79 E( 3, 14)= 81 N( 3, 14)= 113 S( 3, 14)= 47  
 P( 3, 15)= 81 W( 3, 15)= 80 E( 3, 15)= 82 N( 3, 15)= 114 S( 3, 15)= 48  
 P( 3, 16)= 82 W( 3, 16)= 81 E( 3, 16)= 83 N( 3, 16)= 115 S( 3, 16)= 49  
 P( 3, 17)= 83 W( 3, 17)= 82 E( 3, 17)= 84 N( 3, 17)= 116 S( 3, 17)= 50  
 P( 3, 18)= 84 W( 3, 18)= 83 E( 3, 18)= 85 N( 3, 18)= 117 S( 3, 18)= 51  
 P( 3, 19)= 85 W( 3, 19)= 84 E( 3, 19)= 86 N( 3, 19)= 118 S( 3, 19)= 52  
 P( 3, 20)= 86 W( 3, 20)= 85 E( 3, 20)= 87 N( 3, 20)= 119 S( 3, 20)= 53  
 P( 3, 21)= 87 W( 3, 21)= 86 E( 3, 21)= 88 N( 3, 21)= 120 S( 3, 21)= 54  
 P( 3, 22)= 88 W( 3, 22)= 87 E( 3, 22)= 89 N( 3, 22)= 121 S( 3, 22)= 55  
 P( 3, 23)= 89 W( 3, 23)= 88 E( 3, 23)= 90 N( 3, 23)= 122 S( 3, 23)= 56  
 P( 3, 24)= 90 W( 3, 24)= 89 E( 3, 24)= 91 N( 3, 24)= 123 S( 3, 24)= 57  
 P( 3, 25)= 91 W( 3, 25)= 90 E( 3, 25)= 92 N( 3, 25)= 124 S( 3, 25)= 58

P( 3, 26)= 92 W( 3, 26)= 91 E( 3, 26)= 93 N( 3, 26)= 125 S( 3, 26)= 59  
 P( 3, 27)= 93 W( 3, 27)= 92 E( 3, 27)= 94 N( 3, 27)= 126 S( 3, 27)= 60  
 P( 3, 28)= 94 W( 3, 28)= 93 E( 3, 28)= 95 N( 3, 28)= 127 S( 3, 28)= 61  
 P( 3, 29)= 95 W( 3, 29)= 94 E( 3, 29)= 96 N( 3, 29)= 128 S( 3, 29)= 62  
 P( 3, 30)= 96 W( 3, 30)= 95 E( 3, 30)= 97 N( 3, 30)= 129 S( 3, 30)= 63

ÚLTIMO PONTO DIREITO INFERIOR (fundo do tanque)

P( 3, 31)= 97 W( 3, 31)= 96 E( 3, 31)= 98 N( 3, 31)= 130 S( 3, 31)= 64

Da mesma forma foram mostrados somente os procedimentos iniciais para os valores de entrada e o endereçamento para os pontos da superfície livre (linha genérica da superfície). Ver as figuras (4.9) e (4.10). Os valores foram gerados pelas Subrotina SUPERFICIE\_LIVRE e estão listados abaixo.

NO TOTAL SAO 31 VELOCIDADES "FREE SLIP" NA INTERFACE AR-AGUA (m/s).  
 Pontos da superfície livre.

UFREE(2015)= .000, UFREE(2016)= .005, UFREE(2017)= .007, UFREE(2018)= .009,  
 UFREE(2019)= .011, UFREE(2020)= .014, UFREE(2021)= .016, UFREE(2022)= .019,  
 UFREE(2023)= .020, UFREE(2024)= .024, UFREE(2025)= .026, UFREE(2026)= .029,  
 UFREE(2027)= .030, UFREE(2028)= .030, UFREE(2029)= .030, UFREE(2030)= .027,  
 UFREE(2031)= .026, UFREE(2032)= .024, UFREE(2033)= .023, UFREE(2034)= .020,  
 UFREE(2035)= .019, UFREE(2036)= .015, UFREE(2037)= .014, UFREE(2038)= .010  
 UFREE(2039)= .009, UFREE(2040)= .006, UFREE(2041)= .005, UFREE(2042)= .003  
 UFREE(2043)= .002, UFREE(2044)= .001, UFREE(2045)= .000

#### 5.4 CÁLCULO DOS COEFICIENTES EXPERIMENTAIS $K_L$ E PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS E HIDRÁULICOS DO MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA

O algoritmo TANK.FOR possui uma estrutura em que as rotinas foram utilizadas para a solução das equações não-lineares da continuidade, transporte quantidade de movimento e massa. Primeiramente foi verificada a programação da malha bi-dimensional e testado o algoritmo SIMPLER. Uma vez que o escoamento estava definido, para cada rotação da turbina (rps) e temperatura fixa ( $^{\circ}\text{C}$ ), mostrado abaixo no exemplo de saída de resultados experimentais, os coeficientes experimentais denominado de  $K_{Lexp}$  foram comparados com os coeficientes da simulação, denominado de  $K_{Lsim}$ .

Como foi discutido anteriormente os coeficientes de troca  $K_L$  obtidos pela simulação foram comparados com os resultados experimentais de vários autores da literatura. No presente trabalho aplicou-se o modelo de transferência de SCHULZ *et al* (1991, 1992). O elo de ligação entre os campos de velocidade (figura 5.1) foram as variáveis definidas pelo símbolo  $a$  do modelo de SCHULZ *et al* (1991, 1992). A

subrotina XAST incorporou os valores experimentais dos autores em questão: CUNHA (1993), MOMESSO (1996) e HSIEH (1993). Abaixo foram apresentados alguns exemplos de saída de parâmetros dos experimentos de CUNHA (1993).

As variáveis designadas por  $a$  são as velocidades da extremidade da turbina  $U_{tip}$  (dadas em m/s); DH é o comprimento do raio da turbina; T0 é a temperatura de partida, no caso 15 °C, para todos os experimentos; TK é a temperatura correspondente em Kelvin; GAS é o número de gases que se trabalhou (para Cunha igual a 3); MT é o número de passos da temperatura (CUNHA, 1993 - igual a 4 temperaturas: 15, 20, 25 e 30° C);  $X_B = 2,6$  é um parâmetro da equação de Wilke-Chang para calcular a difusividade molecular dos gases);  $M_B$  é peso molecular da água (solvente);  $V_C$  é o volume crítico para cada gás;  $\mu$  é a viscosidade dinâmica em cP; e  $D_{AB}$  é o coeficiente de difusão molecular do gás na água, na respectiva temperatura.

SUBROTINA PARA CALCULAR DAB  
E PARÂMETROS ADIMENSIONAIS  
RELEVANTES COMO:  $M^*$  e  $X^*_{MIN}$

ARQUIVO DE SAIDA DE DADOS - Experimentos de Cunha (1993)

PARAMETROS FISICOS DO TANQUE DE AGITACAO

ALTURA H = .30 m DH = .10 m  
a( 1)= 82.00rpm al( 1)= .43rps  
a( 2)= 104.00rpm al( 2)= .54rps  
a( 3)= 280.00rpm al( 3)= 1.47rps  
a( 4)= 303.00rpm al( 4)= 1.59rps  
a( 5)= 404.00rpm al( 5)= 2.12rps  
a( 6)= 505.00rpm al( 6)= 2.64rps  
a( 7)= 730.00rpm al( 7)= 3.82rps  
a( 8)= 860.00rpm al( 8)= 4.50rps  
a( 9)= 910.00rpm al( 9)= 4.76rps  
a(10)= 1080.00rpm al(10)= 5.65rps  
a(11)= 1280.00rpm al(11)= 6.70rps  
a(12)= 1700.00rpm al(12)= 8.90rps

PARAMETROS PARA O CALCULO DE DAB  $M^*$  E  $X^*_{min}$

T0 = 15.00oC GAS = 3 No MT = 4 PASSOS XB = 2.6 ADIM MB = 18.00g/g-mol  
VALORES DE VOLUMES CRITICOS E VOLUMES MOLARES

VC(MET) = 99.00 cm3/g VA(MET) = 35.18 cm3/g  
VC(ACET) = 113.00 cm3/g VA(ACET) = 40.41 cm3/g  
VC(ETIL) = 129.00 cm3/g VA(ETIL) = 46.42 cm3/g  
TC( 1) = 15.00 oC TK( 1) = 288.15 K  $\mu$ ( 1) = 1.15 cP DAB( 1) = 1.504E-09 m2/s

\*\*\* M E T A N O - CH4 \*\*\*

a( 1)= 82.00rpm al( 1)= .43rps  $M^*( 1)$ = 8.56E+07  
a( 2)= 104.00rpm al( 2)= .54rps  $M^*( 2)$ = 1.09E+08  
a( 3)= 280.00rpm al( 3)= 1.47rps  $M^*( 3)$ = 2.92E+08

$a(4) = 303.00\text{rpm}$   $a_l(4) = 1.59\text{rps}$   $M^*(4) = 3.16\text{E}+08$   
 $a(5) = 404.00\text{rpm}$   $a_l(5) = 2.12\text{rps}$   $M^*(5) = 4.22\text{E}+08$   
 $a(6) = 505.00\text{rpm}$   $a_l(6) = 2.64\text{rps}$   $M^*(6) = 5.27\text{E}+08$   
 $a(7) = 730.00\text{rpm}$   $a_l(7) = 3.82\text{rps}$   $M^*(7) = 7.62\text{E}+08$   
 $a(8) = 860.00\text{rpm}$   $a_l(8) = 4.50\text{rps}$   $M^*(8) = 8.98\text{E}+08$   
 $a(9) = 910.00\text{rpm}$   $a_l(9) = 4.76\text{rps}$   $M^*(9) = 9.50\text{E}+08$   
 $a(10) = 1080.00\text{rpm}$   $a_l(10) = 5.65\text{rps}$   $M^*(10) = 1.13\text{E}+09$   
 $a(11) = 1280.00\text{rpm}$   $a_l(11) = 6.70\text{rps}$   $M^*(11) = 1.34\text{E}+09$   
 $a(12) = 1700.00\text{rpm}$   $a_l(12) = 8.90\text{rps}$   $M^*(12) = 1.78\text{E}+09$

VALORES DE  $X^{\text{min}}$  (KL em  $\text{s}^{-1}$ )

$a_l(1) = .43\text{rps}$   $XT(1) = 1.48\text{E}-13$   $KL = 1.82\text{E}-05$   
 $a_l(2) = .54\text{rps}$   $XT(2) = 1.50\text{E}-13$   $KL = 2.95\text{E}-05$   
 $a_l(3) = 1.47\text{rps}$   $XT(3) = 4.18\text{E}-14$   $KL = 5.97\text{E}-05$   
 $a_l(4) = 1.59\text{rps}$   $XT(4) = 3.78\text{E}-14$   $KL = 6.32\text{E}-05$   
 $a_l(5) = 2.12\text{rps}$   $XT(5) = 2.29\text{E}-14$   $KL = 6.82\text{E}-05$   
 $a_l(6) = 2.64\text{rps}$   $XT(6) = 2.64\text{E}-14$   $KL = 1.23\text{E}-04$   
 $a_l(7) = 3.82\text{rps}$   $XT(7) = 2.78\text{E}-14$   $KL = 2.70\text{E}-04$   
 $a_l(8) = 4.50\text{rps}$   $XT(8) = 2.95\text{E}-14$   $KL = 3.98\text{E}-04$   
 $a_l(9) = 4.76\text{rps}$   $XT(9) = 2.94\text{E}-14$   $KL = 4.43\text{E}-04$   
 $a_l(10) = 5.65\text{rps}$   $XT(10) = 2.32\text{E}-14$   $KL = 4.93\text{E}-04$   
 $a_l(11) = 6.70\text{rps}$   $XT(11) = 2.57\text{E}-14$   $KL = 7.67\text{E}-04$   
 $a_l(12) = 8.90\text{rps}$   $XT(12) = 6.92\text{E}-14$   $KL = 3.64\text{E}-03$

$TC(1) = 15.00$  oC  $TK(1) = 288.15$  K  $Mu(1) = 1.15$  cP  $DAB(1) = 1.384\text{E}-09$  m<sup>2</sup>/s

\*\*\*ACETILENO - C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>\*\*\*

$a(1) = 82.00\text{rpm}$   $a_l(1) = .43\text{rps}$   $M^*(1) = 9.31\text{E}+07$   
 $a(2) = 104.00\text{rpm}$   $a_l(2) = .54\text{rps}$   $M^*(2) = 1.18\text{E}+08$   
 $a(3) = 280.00\text{rpm}$   $a_l(3) = 1.47\text{rps}$   $M^*(3) = 3.18\text{E}+08$   
 $a(4) = 303.00\text{rpm}$   $a_l(4) = 1.59\text{rps}$   $M^*(4) = 3.44\text{E}+08$   
 $a(5) = 404.00\text{rpm}$   $a_l(5) = 2.12\text{rps}$   $M^*(5) = 4.59\text{E}+08$   
 $a(6) = 505.00\text{rpm}$   $a_l(6) = 2.64\text{rps}$   $M^*(6) = 5.73\text{E}+08$   
 $a(7) = 730.00\text{rpm}$   $a_l(7) = 3.82\text{rps}$   $M^*(7) = 8.28\text{E}+08$   
 $a(8) = 860.00\text{rpm}$   $a_l(8) = 4.50\text{rps}$   $M^*(8) = 9.76\text{E}+08$   
 $a(9) = 910.00\text{rpm}$   $a_l(9) = 4.76\text{rps}$   $M^*(9) = 1.03\text{E}+09$   
 $a(10) = 1080.00\text{rpm}$   $a_l(10) = 5.65\text{rps}$   $M^*(10) = 1.23\text{E}+09$   
 $a(11) = 1280.00\text{rpm}$   $a_l(11) = 6.70\text{rps}$   $M^*(11) = 1.45\text{E}+09$   
 $a(12) = 1700.00\text{rpm}$   $a_l(12) = 8.90\text{rps}$   $M^*(12) = 1.93\text{E}+09$

VALORES DE  $X^{\text{min}}$  (KL em  $\text{s}^{-1}$ )

$a_l(1) = .43\text{rps}$   $XT(1) = 1.44\text{E}-13$   $KL = 1.92\text{E}-05$   
 $a_l(2) = .54\text{rps}$   $XT(2) = 1.66\text{E}-13$   $KL = 3.55\text{E}-05$   
 $a_l(3) = 1.47\text{rps}$   $XT(3) = 4.30\text{E}-14$   $KL = 6.68\text{E}-05$   
 $a_l(4) = 1.59\text{rps}$   $XT(4) = 4.07\text{E}-14$   $KL = 7.40\text{E}-05$   
 $a_l(5) = 2.12\text{rps}$   $XT(5) = 2.52\text{E}-14$   $KL = 8.13\text{E}-05$   
 $a_l(6) = 2.64\text{rps}$   $XT(6) = 2.60\text{E}-14$   $KL = 1.32\text{E}-04$   
 $a_l(7) = 3.82\text{rps}$   $XT(7) = 2.73\text{E}-14$   $KL = 2.88\text{E}-04$   
 $a_l(8) = 4.50\text{rps}$   $XT(8) = 2.96\text{E}-14$   $KL = 4.33\text{E}-04$   
 $a_l(9) = 4.76\text{rps}$   $XT(9) = 2.94\text{E}-14$   $KL = 4.83\text{E}-04$   
 $a_l(10) = 5.65\text{rps}$   $XT(10) = 2.25\text{E}-14$   $KL = 5.19\text{E}-04$   
 $a_l(11) = 6.70\text{rps}$   $XT(11) = 2.52\text{E}-14$   $KL = 8.16\text{E}-04$   
 $a_l(12) = 8.90\text{rps}$   $XT(12) = 3.03\text{E}-14$   $KL = 1.73\text{E}-03$

$TC(1) = 15.00$  oC  $TK(1) = 288.15$  K  $Mu(1) = 1.15$  cP  $DAB(1) = 1.273\text{E}-09$  m<sup>2</sup>/s

\*\*\*ETILENO - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>\*\*\*

$a(1) = 82.00\text{rpm}$   $a_l(1) = .43\text{rps}$   $M^*(1) = 1.01\text{E}+08$   
 $a(2) = 104.00\text{rpm}$   $a_l(2) = .54\text{rps}$   $M^*(2) = 1.28\text{E}+08$   
 $a(3) = 280.00\text{rpm}$   $a_l(3) = 1.47\text{rps}$   $M^*(3) = 3.45\text{E}+08$



$a(4) = 303.00\text{rpm}$   $a1(4) = 1.59\text{rps}$   $M^*(4) = 3.74\text{E}+08$   
 $a(5) = 404.00\text{rpm}$   $a1(5) = 2.12\text{rps}$   $M^*(5) = 4.98\text{E}+08$   
 $a(6) = 505.00\text{rpm}$   $a1(6) = 2.64\text{rps}$   $M^*(6) = 6.23\text{E}+08$   
 $a(7) = 730.00\text{rpm}$   $a1(7) = 3.82\text{rps}$   $M^*(7) = 9.00\text{E}+08$   
 $a(8) = 860.00\text{rpm}$   $a1(8) = 4.50\text{rps}$   $M^*(8) = 1.06\text{E}+09$   
 $a(9) = 910.00\text{rpm}$   $a1(9) = 4.76\text{rps}$   $M^*(9) = 1.12\text{E}+09$   
 $a(10) = 1080.00\text{rpm}$   $a1(10) = 5.65\text{rps}$   $M^*(10) = 1.33\text{E}+09$   
 $a(11) = 1280.00\text{rpm}$   $a1(11) = 6.70\text{rps}$   $M^*(11) = 1.58\text{E}+09$   
 $a(12) = 1700.00\text{rpm}$   $a1(12) = 8.90\text{rps}$   $M^*(12) = 2.10\text{E}+09$

VALORES DE  $X^*\text{min}$  (KL em  $\text{s}^{-1}$ )

$a1(1) = .43\text{rps}$   $XT(1) = 1.75\text{E}-13$   $KL = 2.53\text{E}-05$   
 $a1(2) = .54\text{rps}$   $XT(2) = 1.57\text{E}-13$   $KL = 3.65\text{E}-05$   
 $a1(3) = 1.47\text{rps}$   $XT(3) = 5.49\text{E}-14$   $KL = 9.27\text{E}-05$   
 $a1(4) = 1.59\text{rps}$   $XT(4) = 4.55\text{E}-14$   $KL = 8.98\text{E}-05$   
 $a1(5) = 2.12\text{rps}$   $XT(5) = 3.03\text{E}-14$   $KL = 1.06\text{E}-04$   
 $a1(6) = 2.64\text{rps}$   $XT(6) = 2.58\text{E}-14$   $KL = 1.42\text{E}-04$   
 $a1(7) = 3.82\text{rps}$   $XT(7) = 3.44\text{E}-14$   $KL = 3.94\text{E}-04$   
 $a1(8) = 4.50\text{rps}$   $XT(8) = 3.42\text{E}-14$   $KL = 5.45\text{E}-04$   
 $a1(9) = 4.76\text{rps}$   $XT(9) = 4.04\text{E}-14$   $KL = 7.21\text{E}-04$   
 $a1(10) = 5.65\text{rps}$   $XT(10) = 2.74\text{E}-14$   $KL = 6.89\text{E}-04$   
 $a1(11) = 6.70\text{rps}$   $XT(11) = 3.07\text{E}-14$   $KL = 1.08\text{E}-03$   
 $a1(12) = 8.90\text{rps}$   $XT(12) = 3.73\text{E}-14$   $KL = 2.32\text{E}-03$

## 5.5 TESTANDO O SOLVER DO SISTEMA LINEAR

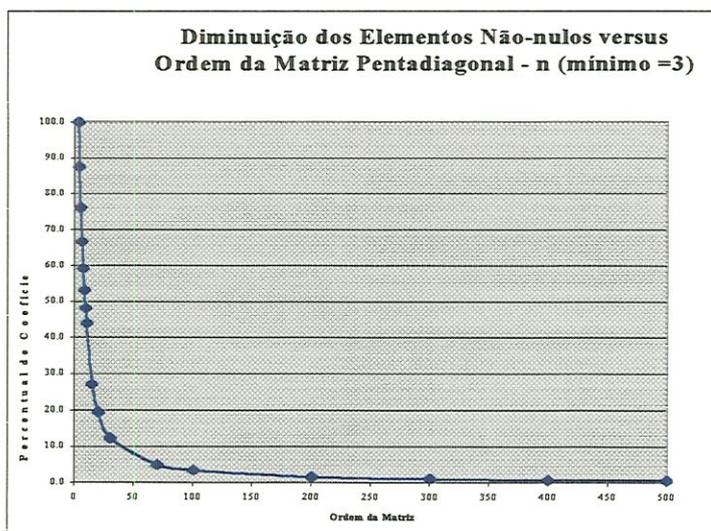
O solver que foi desenvolvido para resolver as equações diferenciais foi testado, para que se eliminasse dúvidas sobre a existência de erros na sua concepção. A seguir, são listados os coeficientes de um sistema pentadiagonal decorrente de um problema simples concebido para este objetivo.

Matriz de Coeficientes						$\Phi(P)$	Ind		
4	-1	←	NCOL	→	-1	1.217410	4		
-1	4	-1			-1	0.419307	0		
	-1	4	-1		-1	0.197793	0		
		-1	4	-1	-1	0.193422	0		
			-1	4	-1	0.321935	0		
-1				-1	4	-1	0.450343	0	
	-1	←	NCOL	→	-1	4	-1	0.262024	0
		-1			-1	4	-1	0.178444	0
			-1		-1	4	-1	0.253960	0
				-1	4		0.643974	2	

Figura 5.3: Testando o Solver (Pentadiagonal com banda Esparsa)

O vetor  $\Phi(P) = \{\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_P\}$ , é o vetor solução do problema. NCOL é o número de pontos em uma linha qualquer da malha computacional. NCOL indica a distância da banda variável, localizada em qualquer posição do domínio considerado. Neste problema todos os coeficientes dos pontos periféricos no entorno do ponto P são iguais a 1, ou seja,  $A_E, A_W, A_N, A_S = 1$ , exceto para os pontos adjacentes do contorno que são nulos como já foi explanado em capítulos anteriores. Para o presente caso,  $\text{Ind}(P)$  seria substituído por  $S_C$  nas equações de cinco pontos.

Na figura abaixo está indicada uma relação entre a diminuição dos elementos não-nulos versus ordem da matriz pentadiagonal. Observa-se que quando a ordem N da matriz aumenta o número relativo de coeficientes não-nulos tende para zero.



**Figura 5.4:** Variação percentual de elementos não-nulos da matriz esparsa versus ordem da matriz.

## 5.6 RESULTADOS DO ALGORITMO TANK.FOR

Preliminarmente, foram resolvidos dois problemas para testar o algoritmo TANK.FOR. Ambos foram de escoamentos incompressíveis desenvolvidos. Estes foram a) escoamento entre duas placas planas e b) escoamento em um tubo cilíndrico. Aqui só foi mostrado o caso do tubo cilíndrico.

A solução analítica do escoamento desenvolvido em um tubo cilíndrico pode ser obtida em termos da distribuição de velocidades,  $W_A(r)$ , ao longo da coordenada  $z$  e da queda de pressão,  $\Delta P$ , ao longo de  $z$ . A solução analítica é:

$$W_A(r) = 2W \left[ 1 - (r/R)^2 \right]$$

onde  $R$  é o raio do tubo  $W$  é velocidade média. A queda de pressão ao longo de um comprimento  $L$  do tubo é:

$$\Delta P = \frac{8\mu WL}{R^2}$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido. A viscosidade da água utilizada foi de  $1,0 \text{ g/cm.s}$  e  $R = 110 \text{ cm}$ ,  $W = 2,0 \text{ cm/s}$ . A queda de pressão no comprimento  $L = 3000 \text{ cm}$  é  $\Delta P = 15,8678 \text{ g/cm.s}^2$ .

As distribuições de velocidades, tanto analítica (teórica) quanto a solução aproximada foram baseadas nas aproximações mostradas no apêndice A da referência BOTELHO e MOREIRA (1991), os quais utilizaram as mesmas aproximações para calcular os diversos coeficientes das equações discretizadas. Os resultados obtidos desta análise estão na tabela 5.2.

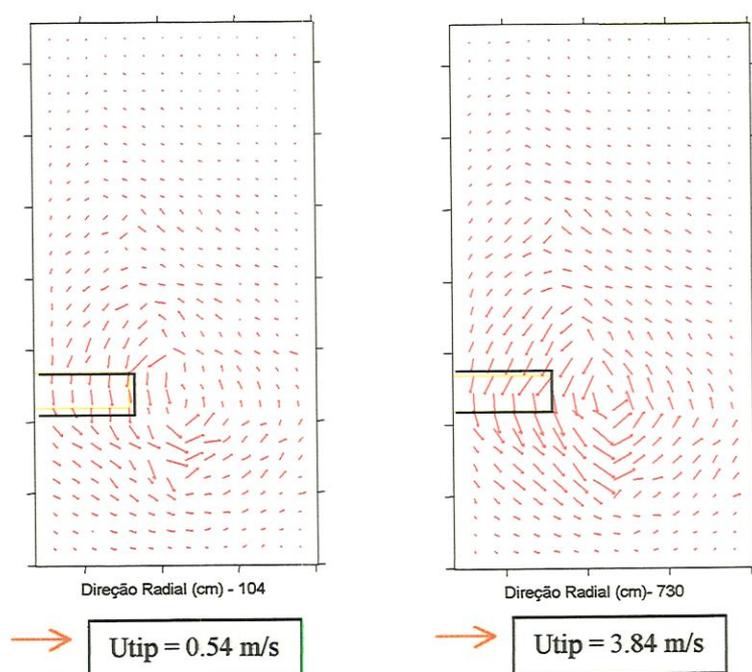
**Tabela 5.2:** Resultados numéricos do problema de escoamento desenvolvido em um tubo cilíndrico com o algoritmo TANK.FOR (adaptado), com simetria axi-simétrica.

y – distância da parede entre 0 - 110 (cm)	Velocidade Analítica (cm/s)	Velocidade Numérica (cm/s) z = 1200 cm	Queda de pressão Numérica (g/cm.s <sup>2</sup> ) Δz = 1500 cm
15	1.9628	1.9616	15,1245
25	1.8968	1.8954	15,1234
35	1.7976	1.7962	15,1213
45	1.6654	1.6648	15,1182
55	1.500	1.4912	15,1174
65	1.3018	1.3008	15,1058
75	1.0704	1.0689	15,0931
85	0.8058	0.8043	15,0883
95	0.5084	0.5074	15,0559
Queda de pressão analítica (g/cm.s <sup>2</sup> )			15,8678

Por meio deste problema foi possível verificar a formulação das condições de contorno aplicadas às equações de transporte.

### 5.6.1 ESCOAMENTO NO TANQUE DE MISTURA COM TURBINA DE SEIS PÁS PLANAS INCLINADAS 45°

O domínio e as condições de contorno foram apresentadas nas figuras 4.6, 4.7, 4.8, 4.9 e 4.10, utilizadas para os tanques indicados na figura 4.2, aproveitando-se da simetria oferecida pela geometria dos tanques. Alguns diagramas das velocidades no instante  $t = 0$  (estacionário), obtidas com o algoritmo TANK.FOR, são mostrados nas figuras abaixo.



**Figura 5.5:** escoamento gerado pelo algoritmo TANK.FOR. Apresentam escoamentos padrão típico de turbinas tipo *PTD*. As figuras 5.5a e 5.5b são simulações de experimentos de CUNHA (1993), respectivamente a 104 e 730 rpm, ambos na temperatura de 15°C.  $U_{tip}$  significa a velocidade tangencial da extremidade da turbina. As velocidades  $U_R$  e  $W_A$  nos contornos da turbina são dependentes deste parâmetro e calculadas pela subrotina *VEL\_ANGULAR* e *CONDICOES\_INICIAS*.

Abaixo são apresentados alguns perfis de velocidades em determinadas posições relevantes  $z/T$ , para todos os autores estudados, em determinadas rotações escolhidas aleatoriamente. Se observarmos uma linha horizontal fixa (por exemplo  $z/T = 0.35$  – próximo da turbina;  $z/T = 0.10$  – altura entre a turbina e fundo do

tanque;  $z/T = 0.90$  – altura próxima da superfície livre) verificamos os referidos perfis de velocidade e o módulo e o sentido (positivo ou negativo) da velocidade.

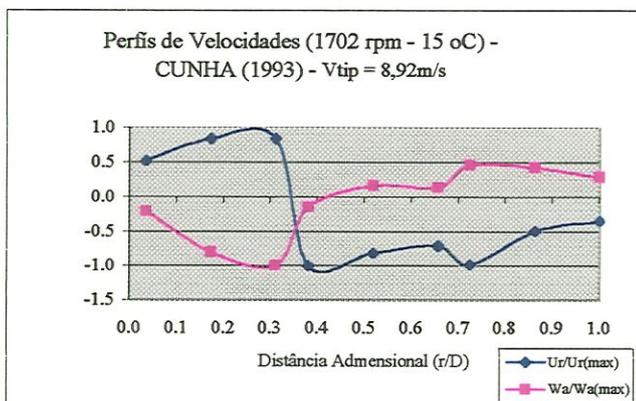


Figura 5.6a: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.33$ )

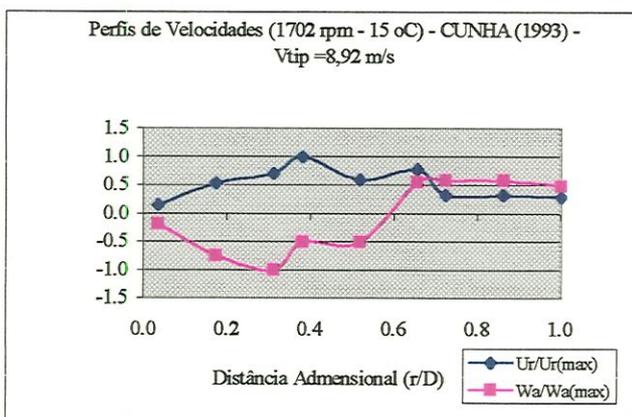


Figura 5.6b: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.12$ ).

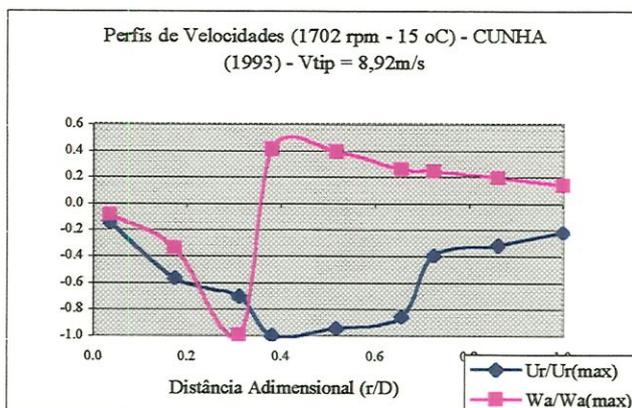
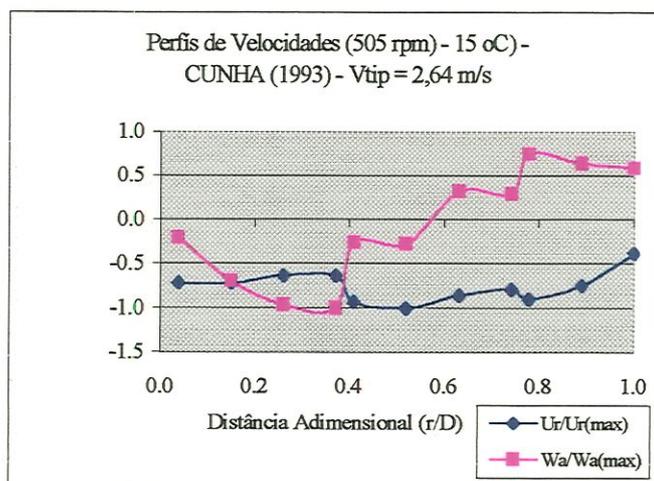
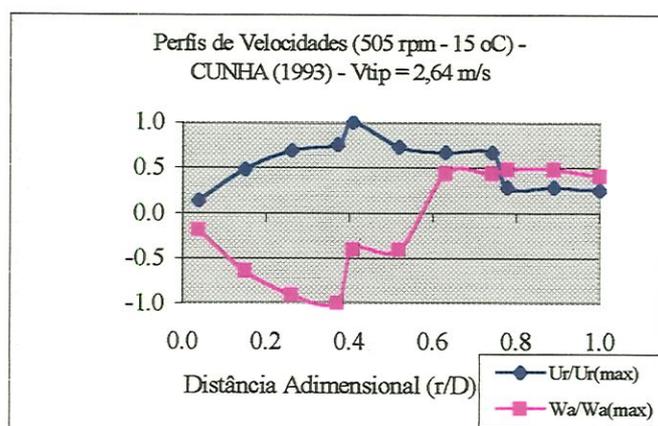


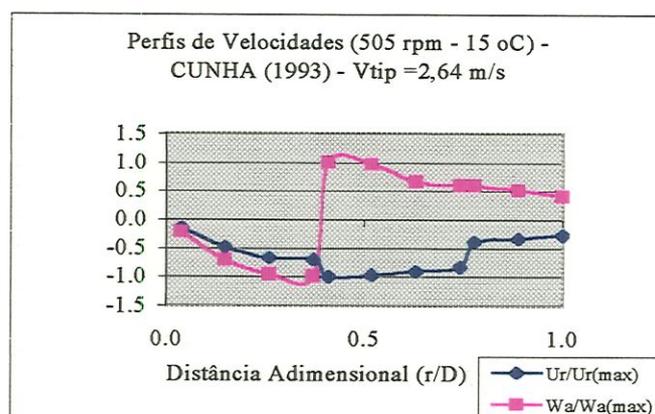
Figura 5.6c: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.9$ ).



**Figura 5.7a:** Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.35$ ).



**Figura 5.7b:** Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.10$ ).



**Figura 5.7c:** Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.9$ ).

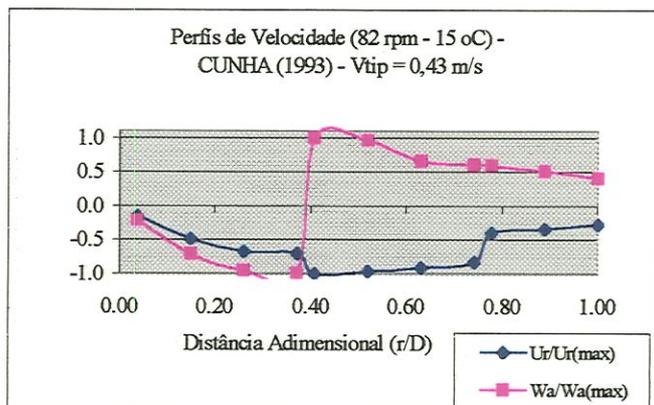


Figura 5.8a: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.9$ ).

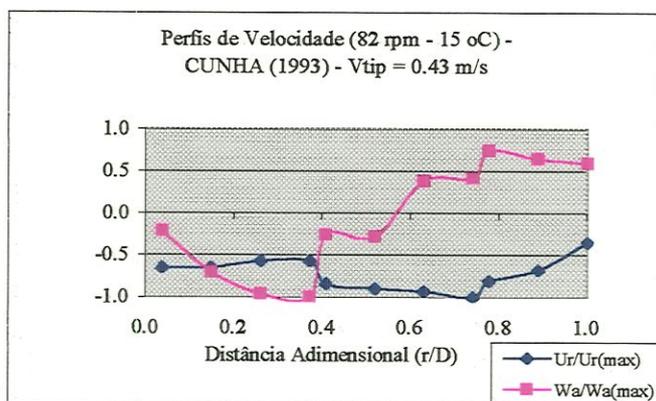


Figura 5.8b: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.35$ ).

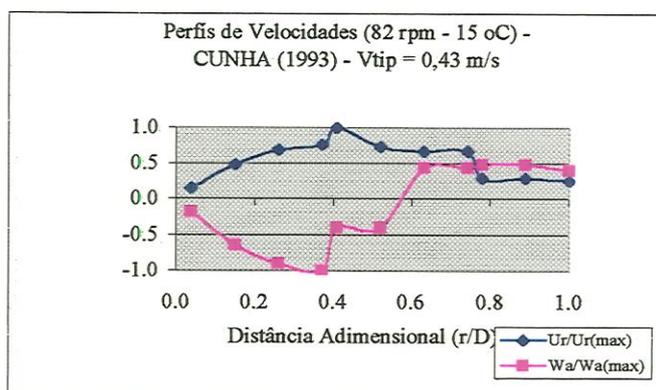


Figura 5.8c: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.10$ ).

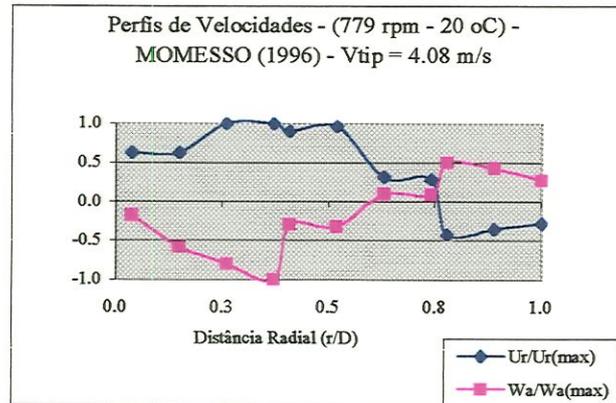


Figura 5.9a: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.25$ ).

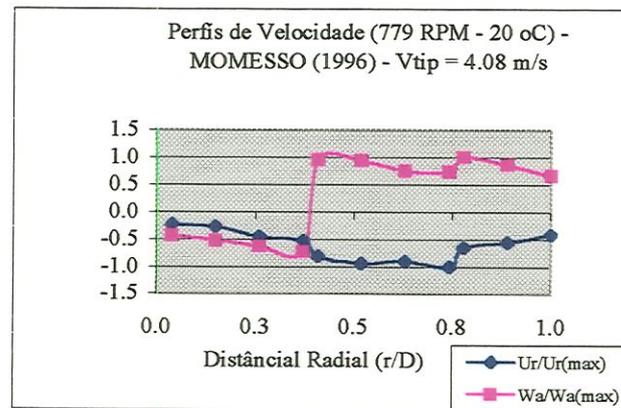


Figura 5.9b: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.75$ ).

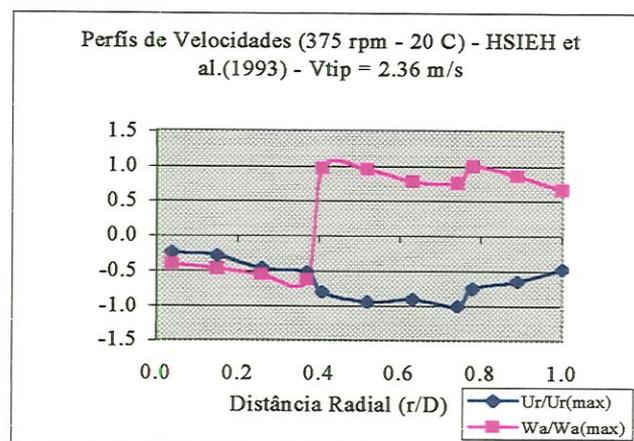


Figura 5.10a: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.74$ ).

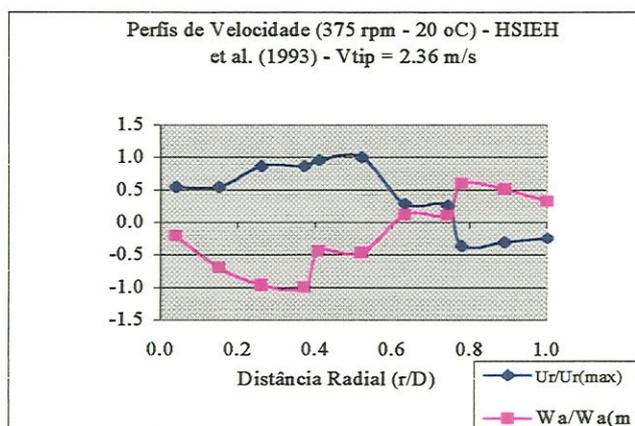


Figura 5.10b: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.25$ ).

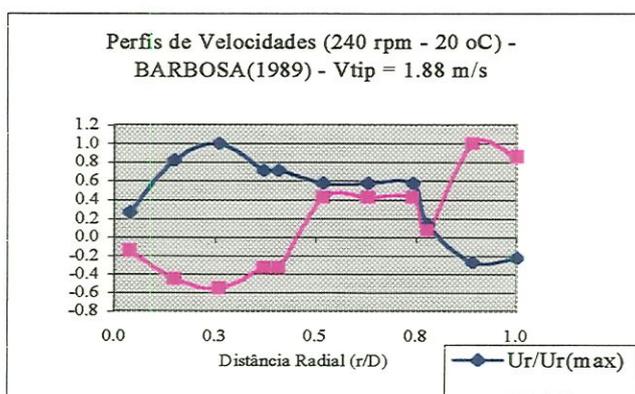


Figura 5.11a: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.09$ ).

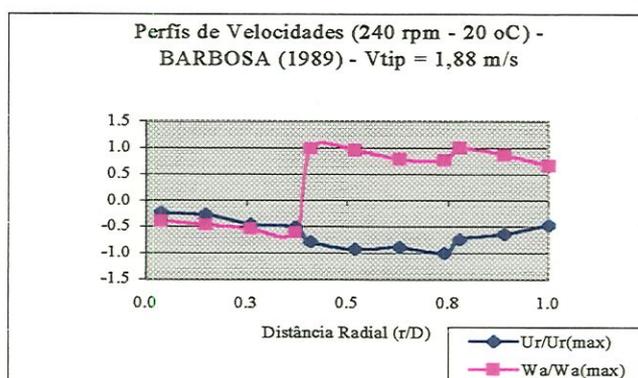


Figura 5.11b: Perfis de velocidade ao longo da distância radial do tanque ( $z/T=0.77$ ).

A velocidade média e a pressão e as outras variáveis tiveram que ser relaxadas para aumentar a velocidade de execução das simulações ou evitar que as mudanças nas iterações fossem muito acentuadas, ocasionando problemas de *overflow* durante os cálculos. Os fatores de relaxação usados no presente trabalho ficaram na faixa de 0.2 a 1.4. Entretanto, a correção de pressão ( $P'$ ) usado no algoritmo SIMPLER foi mais crítica do que as executadas para percorrer as equações de velocidades. O critério de parada foram estipulados quando os resíduos de massa se tornaram menores do que  $10^{-3}$  dentro dos volumes de controle. O critério de convergência utilizou a seguinte inequação

$$\frac{\|\Phi_P^{k+1} - \Phi_P^k\|}{\|\Phi_P^{k+1}\|} \leq \text{Erro}$$

O tamanho da malha afetou a precisão dos cálculos. No presente trabalho os cálculos computacionais foram feitos nas malhas cujo números de pontos foram de  $18 \times 33$ ,  $33 \times 63$  e  $18 \times 123$ . O maior número de pontos na direção axial, como já foi dito, foi feito para que a malha regular captasse pelo menos três pontos na lateral da turbina. Obsevou-se três zonas distintas existentes na região do corpo de água do tanque abaixo da (turbina) e próxima ao eixo de simetria, zona de alta turbulência abaixo da turbina e no plano central e a zona relativamente menos turbulenta acima da turbina.

A indexação das variáveis dependentes foi feita da esquerda para a direita e de baixo para cima formando um único vetor. Trabalhou-se com um armazenamento tipo vetor,  $\phi(P)$ , em vez de  $\phi(i,j)$ , ajudando na implementação das rotinas, e no controle das variáveis e no entendimento do algoritmo, conforme se viu nas figuras 4.9 e 4.10.

Quanto às velocidades radial e axial observou-se que  $U_R$  foi predominante somente próximo ao fundo do tanque e próximo da lateral da turbina. Entretanto,  $W_A$  foi predominante ao longo da turbina e abaixo do desta. E de forma global criou-se um escoamento padrão como pôde ser visto na figura 5.4a,b.

O parâmetro de energia cinética turbulenta,  $k$ , foi qualitativamente similar ao de perfil de  $W_A$ . A hipótese de isotropia no corpo líquido do tanque pareceu boa. Também os efeitos da geometria sobre o escoamento puderam ser verificados.

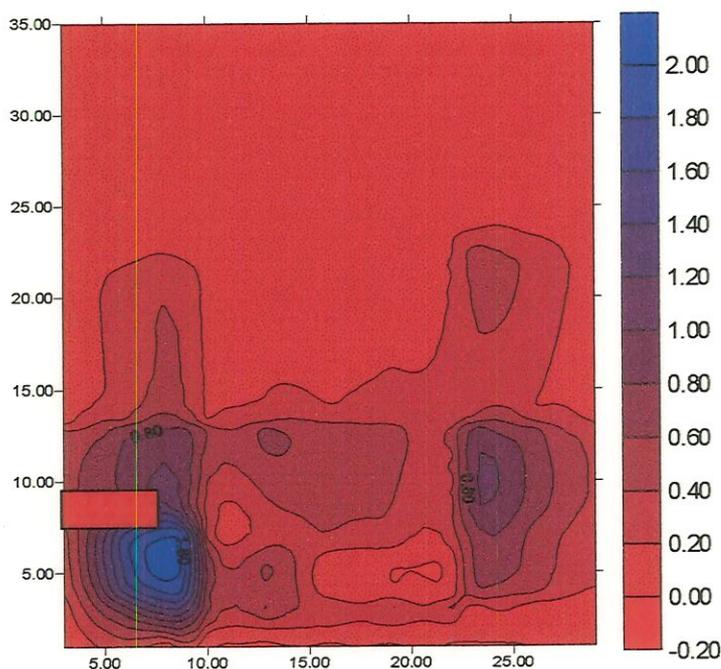
Entretanto, não foram feitas mudanças exageradas nas características geométricas que causassem a descaracterização do escoamento padrão desejado. Isso porque, principalmente no que concerne às estimativas do campo de velocidades iniciais (subrotina CONDICOES\_INICIAIS), as modificações implicariam numa demora ainda maior no tempo de execução do algoritmo.

Alguns dos resultados dos principais parâmetros estudados para as condições padrão estão indicados nas figuras abaixo.

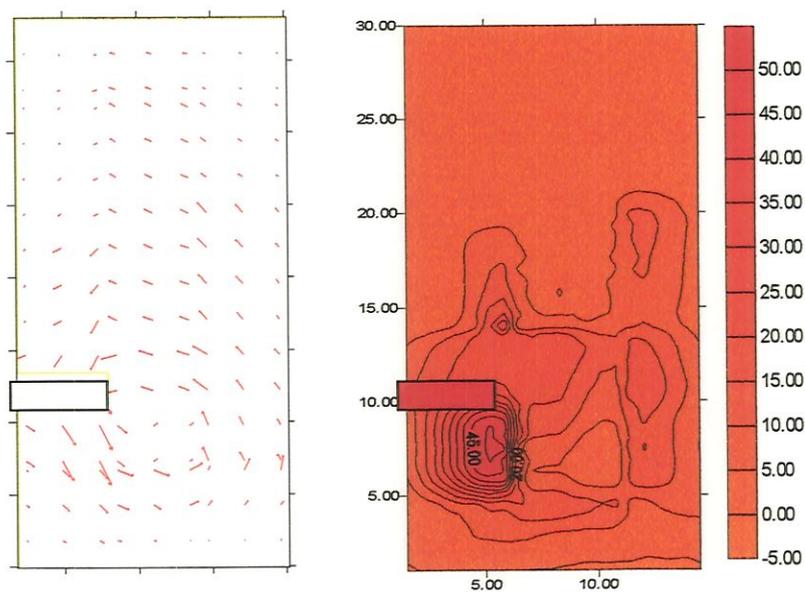
### 5.6.2 – RESULTADOS DOS PARÂMETROS TURBULENTOS E GRANDEZAS ESCALARES (CONCENTRAÇÃO DOS GASES)

Como já foi comentado anteriormente, mesmo o algoritmo tendo sido construído com o intuito da generalidade, incluídas em suas subrotinas, o algoritmo no estágio atual não foi suficientemente otimizado para atender muitas das generalidades atribuídas a ele, como foi o inesperado caso do aumento excessivo da largura para outros sistemas idealizados. Nesses casos ocorreram problemas de divergências. Entretanto, algumas das simulações feitas pelo algoritmo TANK.FOR são mostrados nas figuras abaixo, os quais estão relacionadas com os autores estudados na descrição da metodologia. Desta forma alguns aspectos qualitativos destas previsões foram discutidos.

- a) **Energia Cinética Turbulenta:** o modelo  $k-\varepsilon$  superestimou os valores de energia cinética turbulenta no fundo do tanque. Qualitativamente pode ser dito que o modelo prevê razoavelmente a distribuição de turbulência no corpo do fluido. A figura abaixo mostra alguns dos resultados das simulações

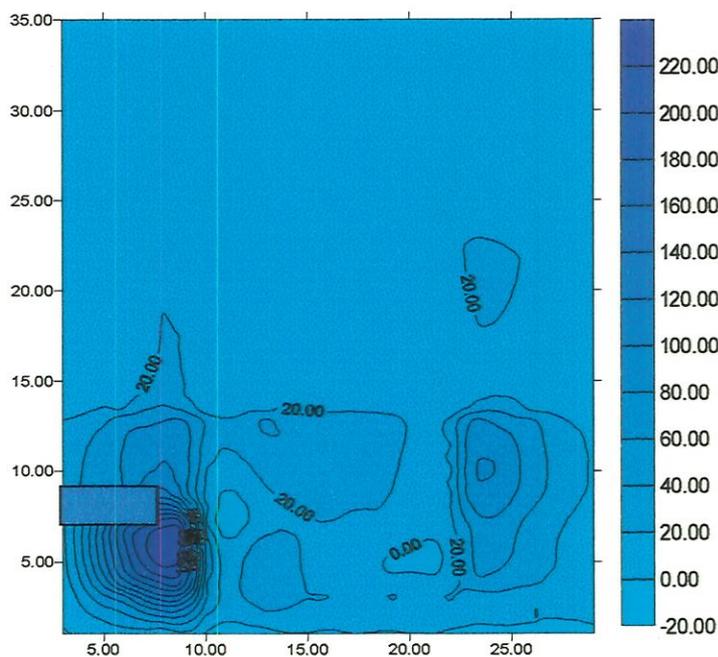


**Figura 5.12a** – Distribuição da energia cinética turbulenta para o escoamento gerado por *PTD*. A figura indica uma característica convectiva do transporte turbulento na região próxima da turbina e próxima da região parede lateral. Condições experimentais de BARBOSA (1989): 240 rpm e 20°C.

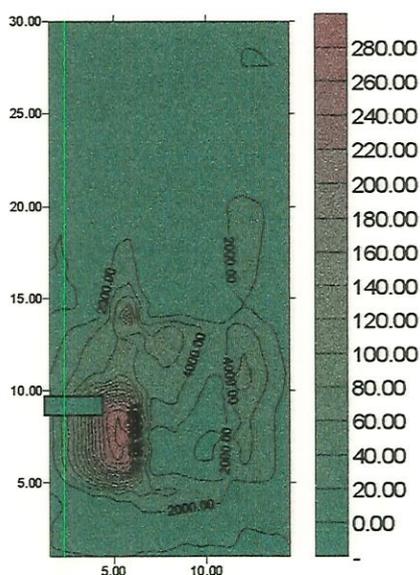


**Figura 5.12b** – Distribuição de velocidade ( $U_{tip} = 8,92 \text{ m/s}$  (→)) e energia cinética turbulenta para o escoamento gerado por *PTD*. A figura indica uma característica convectiva do transporte turbulento na região próxima da turbina e próxima da região parede lateral. Condições experimentais CUNHA (1993): 1702 rpm e 15°C.

- b) Dissipação de Energia Cinética Turbulenta:** devido a não existência de dados experimentais na literatura a taxa de dissipação de energia cinética não pôde ser avaliada no corpo do escoamento. Desta forma a distribuição das taxas de dissipação de energia cinética não pôde ser verificada.



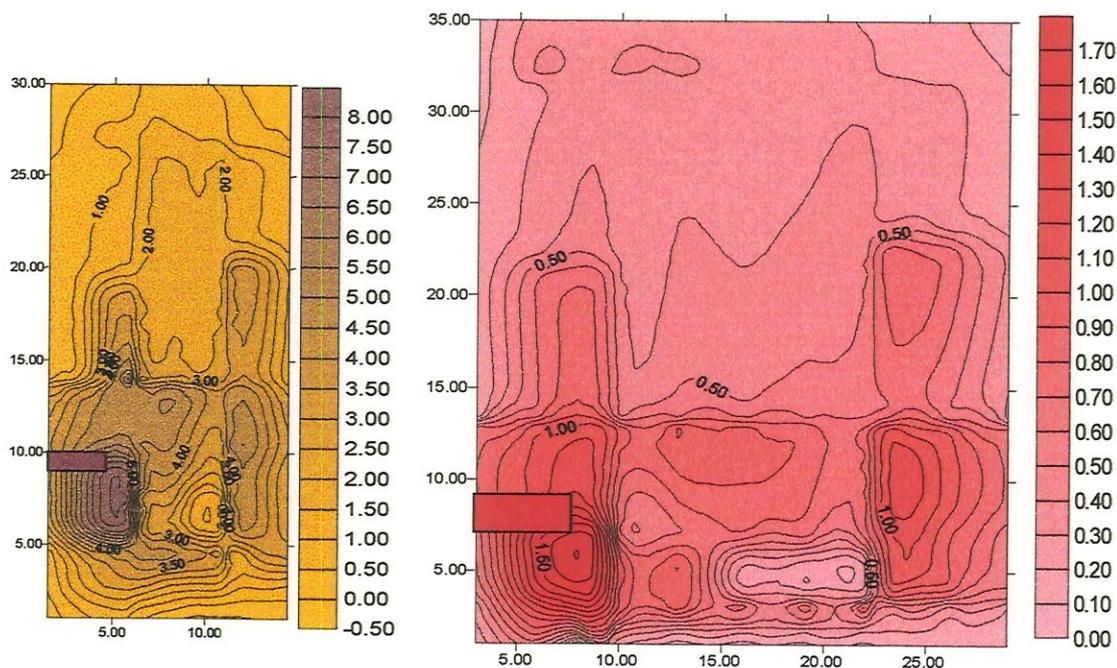
**Figura 5.13a** – Distribuição da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta para o escoamento gerado por PTD. A figura indica uma característica convectiva do transporte turbulento na região próxima da turbina e próxima da região parede lateral. Condições experimentais BARBOSA (1989): 240 rpm e 20°C.



**Figura 5.13b** – Distribuição da taxa de dissipação de energia cinética turbulenta para o escoamento gerado por PTD. A figura indica uma característica convectiva do transporte turbulento na região próxima da turbina e próxima da região parede lateral. Condições experimentais de CUNHA (1993) 1702 rpm e 15°C.

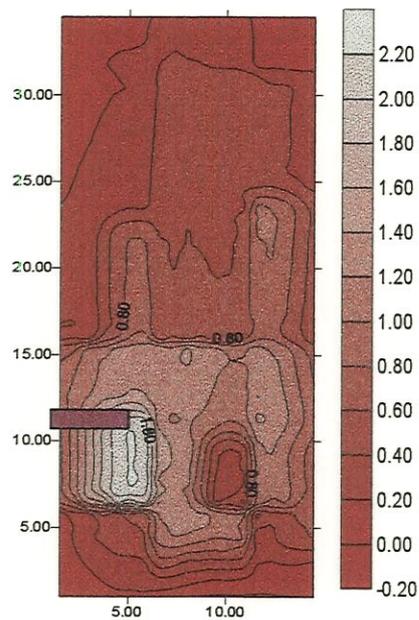
No presente trabalho desprezaram-se os picos de energia e da taxa de dissipação de energia devidos à frequência de passagem das pás das turbinas, de acordo com os comentários de MUJUMDAR *et al.* (1970).

- c) **Viscosidade Turbulenta:** os perfis de viscosidade turbulenta são similares aos de escala de comprimento turbulenta  $l=k^{1.5}/\varepsilon$ . Estes foram da ordem de 0 a 8.5 cm enquanto que as projeções da turbina são de 1 a 3 cm de largura, respectivamente (CUNHA (1993), BARBOSA (1989) e HSIEH *et al.* (1993)).



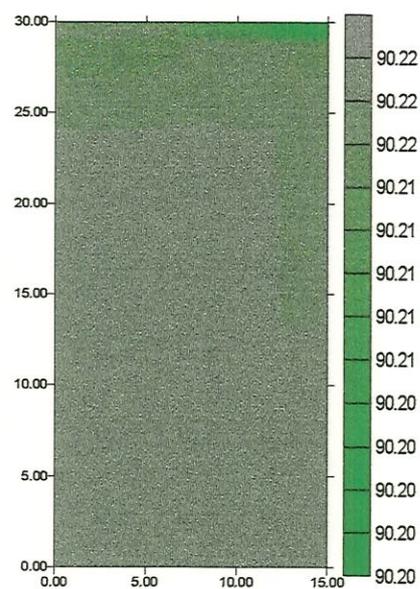
**Figura 5.14a** – Distribuição da viscosidade turbulenta (escala de comprimento). Esses perfis indicam o grau de não homogeneidade no tanque de mistura. Condições experimentais para BARBOSA (1989) e CUNHA (1993), respectivamente.

Pode-se argumentar ainda que existe uma grande necessidade de medidas da taxa de dissipação de energia no corpo do fluido, para várias geometrias, a fim de obter um melhor entendimento da distribuição do consumo de energia no tanque. Até que esta distribuição de consumo de energia seja melhor entendida e quantificada as correlações genéricas que têm sido desenvolvidas usando o conceito de energia por unidade de volume não podem ser confirmadas.

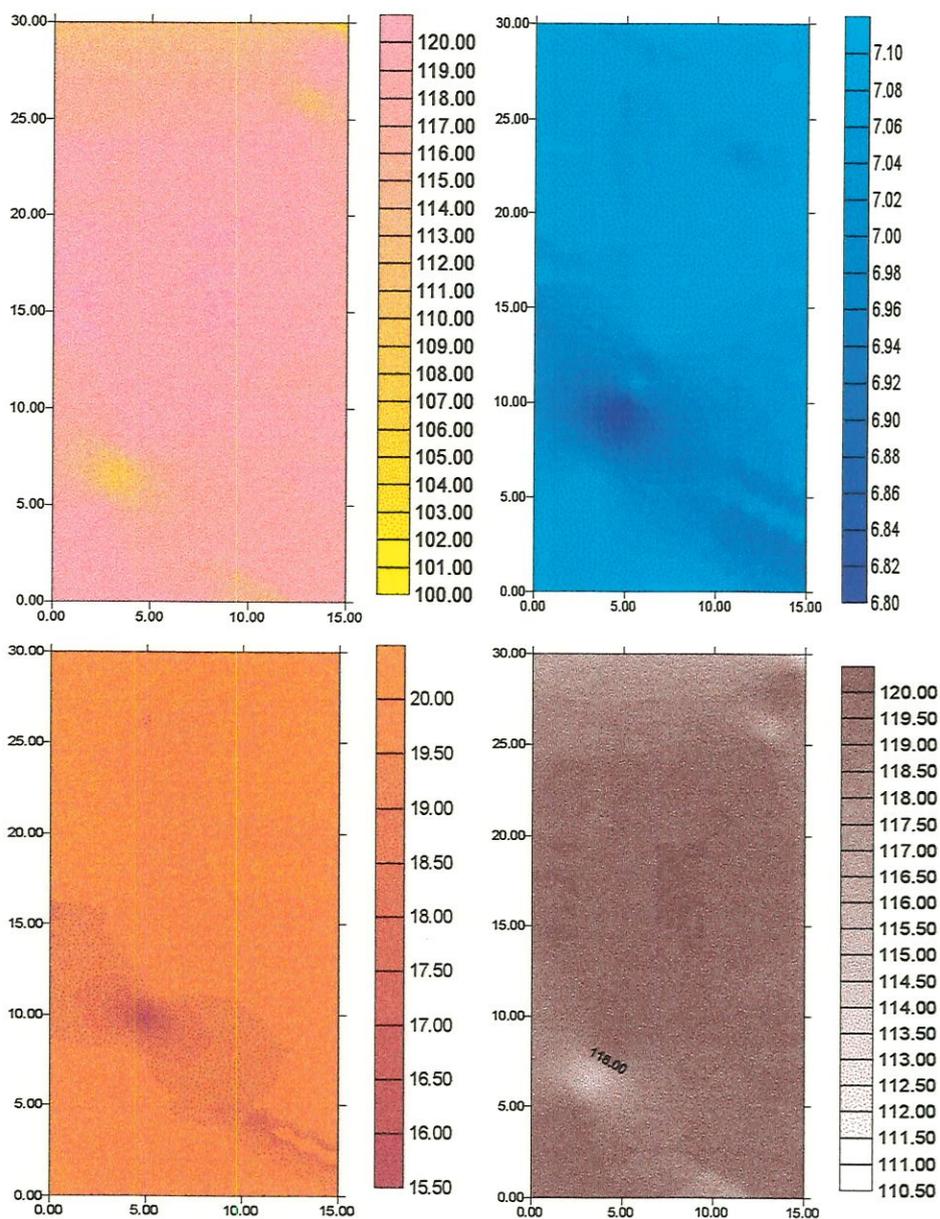


**Figura 5.14b** – Distribuição da viscosidade turbulenta (escala de comprimento). Esses perfis indicam o grau de não homogeneidade no tanque de mistura. Condições experimentais para HSIEH et al (1989).

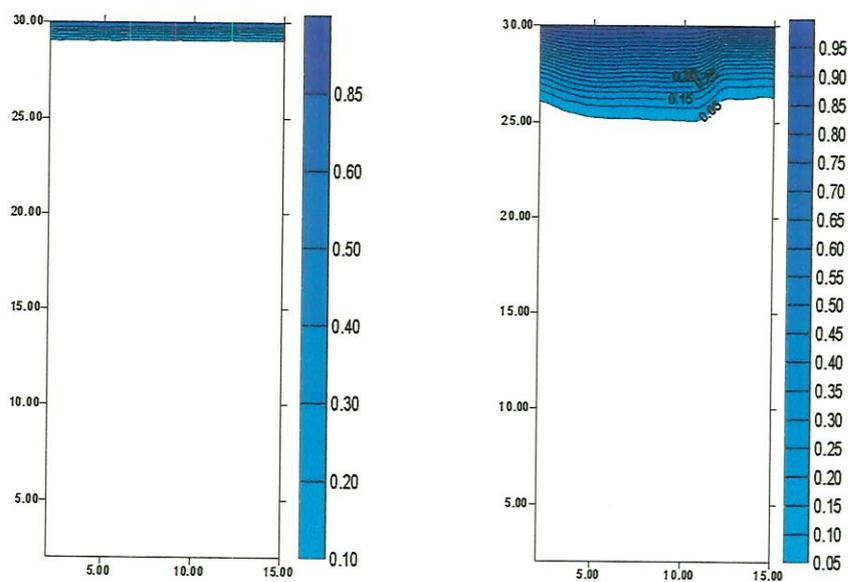
**d) Distribuição da Concentração dos Gases:** a distribuição de concentração para alguns gases são mostrados nas figuras baixo.



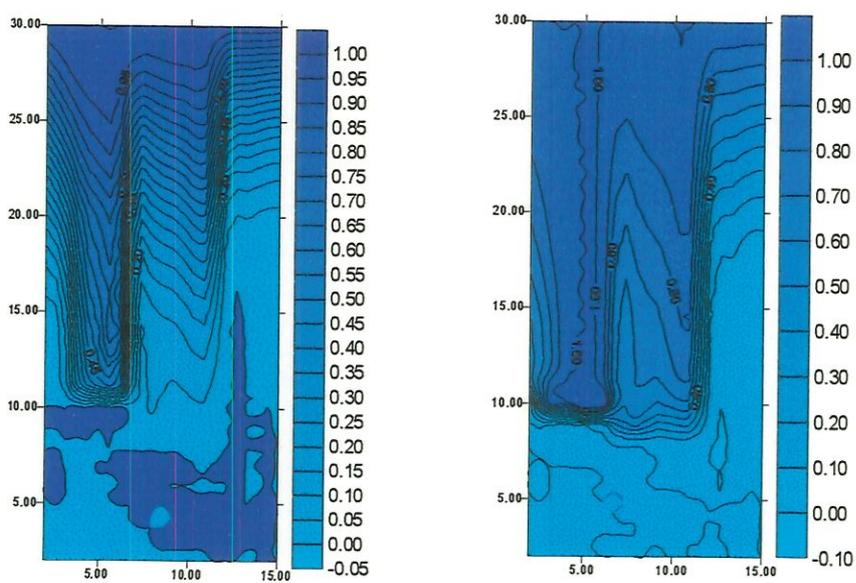
**Figura 5.15a** – Distribuição das concentrações para acetileno (mg/l): Condições experimentais de (CUNHA, 1993 – 1702 rpm) – (C = concentração saturação ou próxima – mg/l).



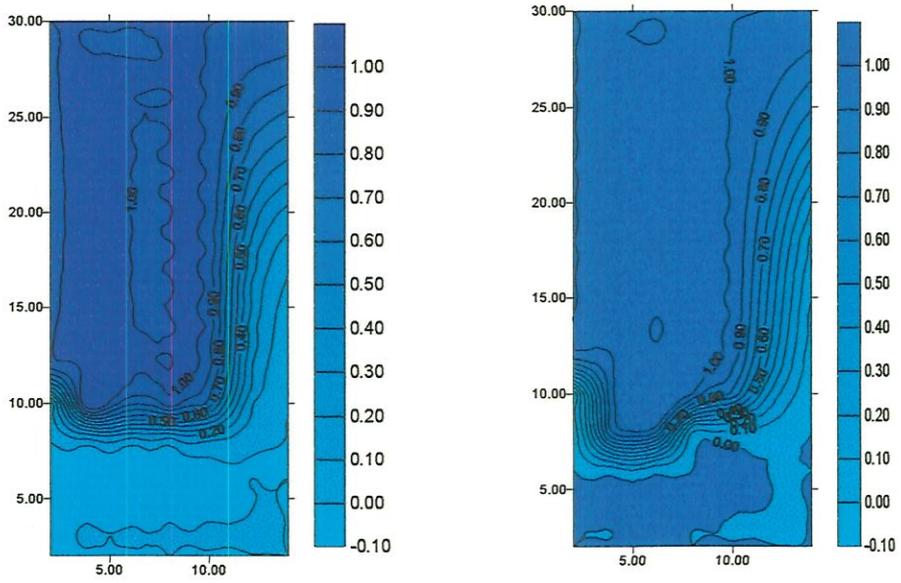
**Figura 5.15b:** – Distribuição das concentrações (mg/l).para alguns gases orgânicos e oxigênio (MOMESSO, 1996 – 779 rpm). a) gás propano (MOMESSO, 1996 – 779 rpm); b) oxigênio, c) metano e d) etileno (CUNHA, 1996 – 1702 rpm), respectivamente. (C = concentração saturação ou próxima – mg/l).



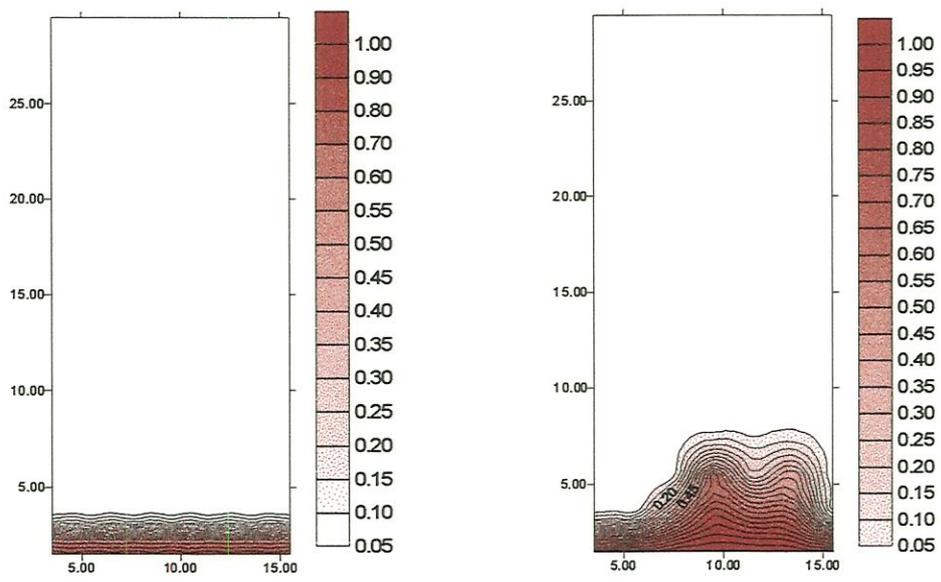
**Figura 5.16a** : Absorção de Oxigênio em regime transiente. MOMESSO (1996) - 1700 rpm - 20°C.  $\tau = 0,1$  s e  $\tau = 3$  s, respectivamente.



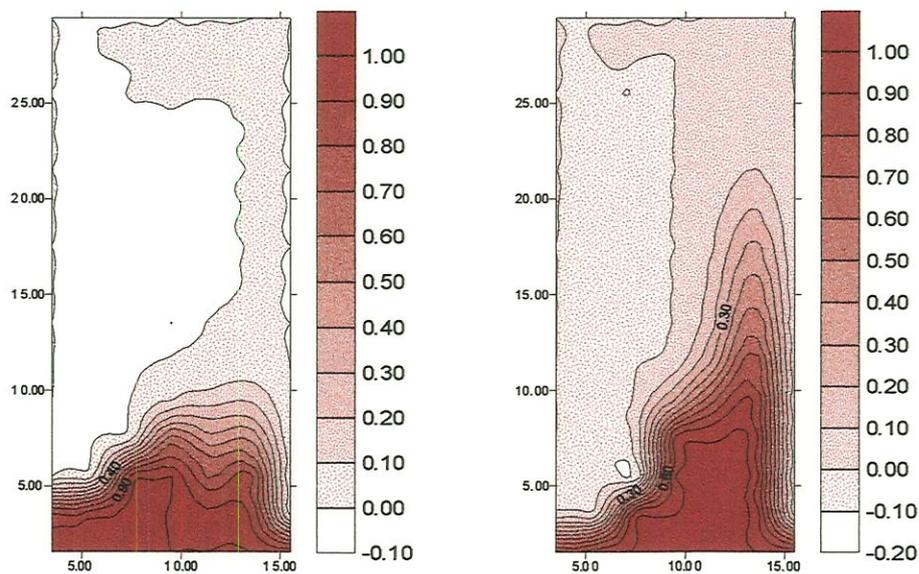
**Figura 5.16b** : Absorção de Oxigênio em regime transiente. MOMESSO (1996) - 1700 rpm - 20°C.  $\tau = 8$  s e  $\tau = 13$  s, respectivamente.



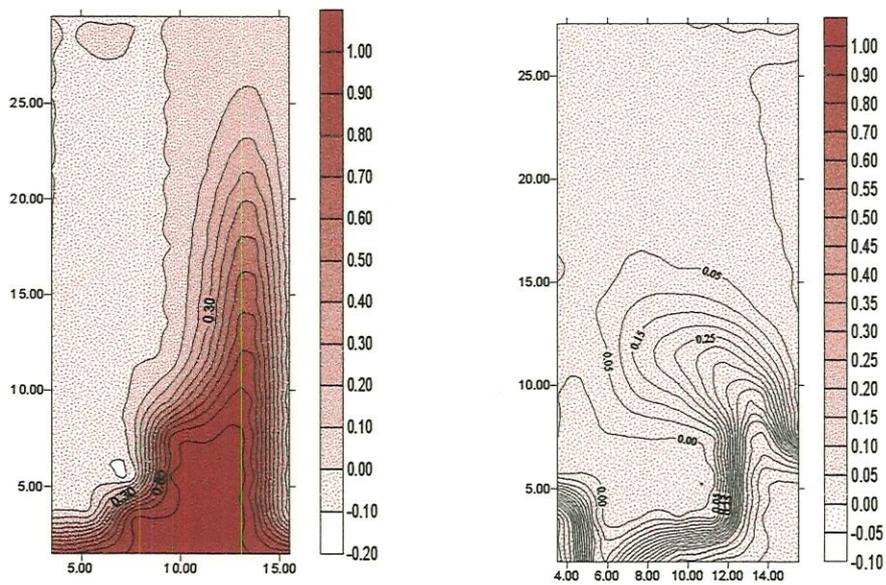
**Figura 5.16c** : Absorção de Oxigênio em regime transiente. MOMESSO (1996) - 1700 rpm - 20°C.  $\tau = 30$  s e  $\tau = 60$  s, respectivamente.



**Figura 5.17a** : Dessorção de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> em regime transiente. CUNHA (1993) - 1702 rpm - 20°C.  $\tau = 0,1$  s e  $\tau = 3$  s, respectivamente.



**Figura 5.17b** : Dessorção de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> em regime transiente. CUNHA (1993) - 1702 rpm – 20°C.  $\tau = 8$  s e  $\tau = 13$  s, respectivamente.



**Figura 5.17c** : Dessorção de C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> em regime transiente. CUNHA (1993) - 1702 rpm – 20°C.  $\tau = 30$  s e  $\tau = 100$  s, respectivamente.

A distribuição de concentração do gás no regime transiente (figuras 5.16-17) pode estabelecer o tempo de mistura mínimo da distribuição total de concentração em tanques de mistura. No presente trabalho esses parâmetros foram úteis para a determinação de eficiência de mistura dos equipamentos e determinação do “tempo de residência” da fase gasosa (tempo de circulação no seio líquido).

Por outro lado algumas simulações de injeção de massa em várias posições da fase líquida mostraram que as concentrações não se homogeneizaram espacialmente, mesmo quando se alcançou o regime permanente. Observando-se as figuras 5.16a,b,c verificam-se zonas em que existem diferenças de concentração mesmo quando o experimento simulado é de alta agitação e, portanto, esperava-se uma homogeneização quase que imediata. E isso não ocorreu, mesmo quando esse tempo era muito longo (acima de 20 min). Outra característica das simulações foi a observação de que a transferência de massa próxima ao impulsor era muito elevada (zonas de alta velocidade) maior do que no restante do tanque ou superfície. Também avaliou-se os coeficientes de transferência de massa em cada célula individualmente, a fim de verificar as taxas de absorção do oxigênio e taxa de dessorção dos compostos orgânicos na água.

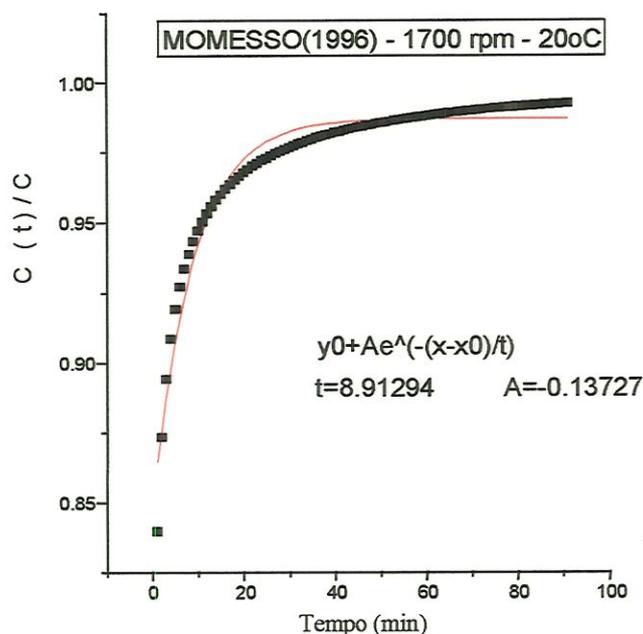
Uma outra utilidade e avaliação das simulações seria o planejamento experimental em tanques de mistura. Por exemplo a localização de uma fonte de gás próximo da turbina, no fundo (como mostrado na figura acima) ou na superfície do tanque. Desta forma foram reportados os resultados dos efeitos do tamanho, velocidade do impulsor, energia introduzida e localização da injeção do gás, os quais foram muito maiores do que os valores reais. Como na realidade não se conhece o real campo de velocidades (devido às simplificações e limitações do modelo de turbulência) os resultados apenas apresentaram as tendências físicas do campo de concentração do gás. Desta forma as conclusões foram que a modelagem de transferência de massa gás-líquido é uma tarefa ainda muito difícil, dadas as limitações desse entendimento hidrodinâmico. Observou-se uma considerável discrepância entre correlações experimentais e simuladas, onde se sugere um maior aprofundamento nos estudos neste campo.

Um dos objetivos da simulação foi também testar a habilidade do algoritmo desenvolvido, independentemente da geometria do sistema e dos processos de troca na interface ar-água. As condições de contorno foram discutidas, como o ponto de injeção de gás na turbina (para o caso de compostos orgânicos). Os resultados das

simulações foram comparados com dados experimentais para os coeficientes globais de transferência. Considerou-se 4 condições de contornos gerais: impulsor, paredes, localização da fonte de injeção de massa próximo da turbina e na superfície (instantânea ou não). As condições de contorno aplicadas para a fase gasosa considerou o fluxo através da parede igual a zero; a superfície livre foi considerada plana, portanto a velocidade normal e os fluxos normais de  $k$  e  $\varepsilon$  são amortecidas em direção à superfície.

As condições de contorno do impulsor e o modelo  $k$ - $\varepsilon$  foram as partes mais falhas da simulação. Estas só poderiam ser melhoradas pelo fornecimento das condições mais detalhadas nas vizinhanças do impulsor. Os resultados indicaram que a energia cinética turbulenta,  $k$ , é maior quando está próxima da superfície inferior da turbina e onde a velocidade é maior. Como esperado ela decresce rapidamente próximo à parede do tanque e na superfície livre, onde a velocidade é baixa. O mesmo acontece com a taxa de dissipação de energia cinética,  $\varepsilon$ .

Na região da superfície agitada turbulenta a distribuição dos grandes turbilhões próxima à superfície concorda qualitativamente com o modelo de transferência de SCHULZ et al. (1991,1992), embora exista uma tendência para os grandes turbilhões serem substituídos mais rapidamente do que previa a equação de transferência estudada. Assim, as velocidades ao longo da superfície foram mais importantes na transferência de massa – (renovação superficial).



**Figura 5.18:** Variação da concentração em uma célula próxima da superfície – Absorção de Oxigênio - MOMESSO (1996) a 1700 rpm (20 °C).  $K_{L (exp)} \cong 0,2184 \text{ min}^{-1}$ .  $K_{L (simulado)} \cong 7,2849 \text{ min}^{-1}$ . Observa-se uma grande diferença, cerca de 33 vezes maior que o esperado ( $K_{L (exp)}$ ).

O valor de  $K_{L (simulado)}$  foi calculado no regime transiente e num ponto central próximo da superfície ( $\cong 1 \text{ cm}$  abaixo da mesma). Por outro lado,  $K_{L (exp)}$  foi determinado globalmente para todo o tanque. Uma sugestão para melhor avaliar e comparar  $K_L$  seria calculá-lo em todas as demais células (determinando uma média) e somente depois fazer as comparações.

Observou-se, no entanto, uma saturação desta célula próxima da superfície mais rapidamente do que seria esperado. Ao se calcular a média total provavelmente os valores de  $K_L$  se aproximariam muito mais do valor experimental.

---

## VI – CONCLUSÃO

Esta tese apresentou um estudo detalhado do problema numérico de escoamento de fluido em tanque de mistura, com geometria cilíndrica associado aos fenômenos de transferência de gases na interface ar-água. Como resultado um método de volumes finitos para resolver o problema foi descrito, acessado e aplicado. Aqui são descritas as mais importantes contribuições do presente estudo.

1) Equações Diferenciais: dentre as várias formas de equações diferenciais de transporte em coordenadas cilíndricas foi escolhida aquela descrita por RANADE *et al.* (1989b). A forma de forte conservação dessas equações foram consideradas favoráveis a partir do ponto de vista da solução numérica, e as razões para isso foram descritas na metodologia e na revisão bibliográfica.

2) Discretização: as equações de transporte foram discretizadas usando a abordagem de volumes finitos. Isto foi feito no espaço físico, de modo que facilmente se dispusesse as informações sobre a malha computacional. Foi utilizado um esquema de interpolação da lei de potência para a avaliação dos termos convectivos e examinados sua economia, estabilidade e adequação para os cálculos em malhas ortogonais.

3) Solução: o arranjo de malha estudada (staggered arrangement) foi considerado adequado uma vez que possibilitou a adaptação de informações obtidas da literatura no domínio estudado. O algoritmo selecionado foi o SIMPLER (PANTANKAR, 1980) por ser o mais indicado pela literatura para o estudo de escoamentos em tanques de mistura. Foi feita uma avaliação do desempenho dos parâmetros de relaxação ( $\omega$ ) para velocidade e pressão sobre a taxa de convergência do processo de solução.

4) Testes e aplicação: o presente estudo foi inicializado para escoamentos cujas soluções exatas ou aproximadas eram conhecidas (escoamento em tubo cilíndrico). Para os escoamentos turbulentos a concordância com os dados experimentais foi quantitativamente insatisfatória, ou seja, além dos erros numéricos, pode ter ocorrido limitações do modelo de turbulência  $k-\epsilon$  e funções de parede,

principalmente no que diz respeito aos pontos próximos da turbina, simetria e cantos do domínio, ou até mesmo na superfície líquida.

5) Foi utilizada uma condição de contorno teórica (da literatura) para  $\epsilon$  na superfície livre para escoamentos 2D como um limite do comportamento modelado da escala de comprimento de turbulência. Foi confirmado que as condições de contorno teórica e as empíricas (utilizadas de maneira geral) deram resultados similares.

7) Os resultados obtidos no algoritmo computacional desenvolvido para este trabalho salientam a importância da simulação para a área da engenharia hidráulica e ambiental nos processos de transferência de gases na interface ar-água. Entretanto, a dificuldade em desenvolver um modelo matemático ficou bastante evidente uma vez que na literatura há grande escassez de estudos relacionados ao escoamento com transferência de massa na superfície líquida.

8) Alguns dos erros apresentados podem estar relacionados ao próprio modelo de turbulência  $k-\epsilon$ . A simulação desenvolvida demonstrou que: a) a variação de temperatura não influenciou no escoamento. Mas, de forma contrária, influenciou na determinação dos coeficientes de troca, quando se utilizou o modelo unidimensional de SCHULZ *et al.* (1991-1992). Portanto, apresentou algum efeito na difusividade molecular ( $D_{AB}$ ) dos gases estudados e, conseqüentemente nos  $K_{L(\text{simulados})}$ .

9) Algumas previsões foram comparadas com dados experimentais. Em muitos aspectos a eles faltam o dado quantitativo. Algumas discordâncias são o resultado de aproximações na modelagem, embora não se descarte também os erros experimentais dos parâmetros de transferência de massa, por exemplo. Um substancial melhoramento na modelagem e quantificação adequada dos dados experimentais pode resolver algumas dessas diferenças e permitir uma faixa mais ampla de comparações.

10) O trabalho conseguiu algum êxito, apesar de algumas dificuldades inerentes a esse tipo de abordagem. O êxito foi o de chamar a atenção para o problema físico da transferência de gases na interface ar-água utilizando-se a abordagem numérica, situando o problema da modelagem da turbulência na

atualidade, subsidiando a reflexão para trabalhos futuros mais efetivos. Desta forma são resumidos algumas das principais conclusões específicas.

a) Desenvolvimento do algoritmo TANK-FOR especialmente elaborado para simular escoamento em tanque de mistura mostrou técnicas numéricas disponíveis, com características próprias, para resolver escoamento turbulento.

b) O algoritmo TANK.FOR usou o algoritmo SIMPLER (proposto por Patankar 1980) e foi indicado pelos estudos anteriores encontrados na revisão da literatura como o melhor da família SIMPLE, para estes casos. As previsões bi-dimensionais do escoamento gerado pela turbina de pás planas inclinadas foram executadas com esse algoritmo. O sistema propulsor do escoamento diferiu daqueles determinados por turbinas de “discos”, em que eles forçam uma descarga de escoamento radial.

c) Em geral, as previsões do modelo corresponderam apenas qualitativamente aos parâmetros descritos na literatura na maioria das simulações. Uma vez que não houve casos em que os escoamentos da literatura foram exatamente iguais, ou houvesse coincidência com todos os parâmetros geométricos e cinéticos estudados, muitas simulações não puderam ser avaliadas para comparações com dados experimentais, tanto do ponto de vista do escoamento, quanto do ponto de vista da transferência de massa, de forma parcial.

d) As velocidades axiais  $W_A$  foram superestimada pelo modelo k- $\epsilon$  em pontos ou linhas próximas da superfície do líquido, aumentando o nível de turbulência nessa região (aumento de  $U_r$ , pelo balanço de massa). Assim, os coeficientes de troca para os valores de  $K_L$  simulados foram superestimados também, quando comparados com os experimentais. Os valores obtidos para algumas das simulações forneceram resultados semelhantes aqueles descritos pelas figuras 5.12 a 5.17. Desta forma a superfície foi estuda de duas formas básicas: A primeira utilizando as velocidades na superfície no cálculo para o escoamento e a segunda para o cálculo da transferência de massa na interface ar-água.

e) Previsões do modelo k- $\epsilon$  usando valores próximos  $C_2 = 1.6$  e  $C_D = 0,125$ , semelhantemente aos estudos de RANADE *et al* (1989b), resultaram numa melhor concordância com dados experimentais. Foi concluído que o par de valores  $C_2$  e  $C_D$  podem ser otimizados para minimizar o erro global entre previsões e dados experimentais.

f) Os perfis computados mostram claramente o escoamento dominado pela convecção no tanque de mistura. O modelo prevê elevados níveis de turbulência na região abaixo da turbina. Apenas menor parcela da energia introduzida é gasta na parte superior da turbina. Da mesma forma as escalas de comprimento turbulenta na corrente do impulsor obtidas foram da ordem de magnitude da largura da pá projetada, aumentando à medida que se afastavam dela.

g) O modelo para o qual o método foi aplicado é simples. Isso porque o campo de escoamento foi admitido bidimensional e as condições de contorno do impulsor aplicadas partiram de simulações prévias em escoamentos semelhantes em tanques de mistura.

h) A turbulência na região do impulsor é altamente não homogênea. Entretanto uma turbulência relativamente homogênea prevalece sobre a maior parte da zona de circulação (fora da região da turbina) exceto abaixo da turbina e um pouco ao lado da altura da turbina.

i) Globalmente as previsões sugeriram que a taxa líquida de dissipação de energia,  $\epsilon$ , foi diferente da obtida por Ranade (1989b). Esta foi dividida entre as regiões da turbina e meio fluido.

k) Aproximadamente 10 a 15% da energia total introduzida foi aparentemente dissipada pela turbina. Isto está abaixo do sistema real, devido provavelmente à ausência de gradientes  $\theta$  no termo de geração G.

## SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Otimização e melhoramentos do código computacional para escoamento bi-dimensional. A incorporação de uma terceira dimensão ou componente angular  $\theta$ , na sua forma completa, talvez ainda não fosse recomendado. A melhor sugestão seria reavaliar o algoritmo na sua forma original 2D de modo que novas formas de resolução dos sistemas tornem-se mais eficientes. Testar novas abordagens das condições de contorno para a turbina e superfície livre.

Fazer os mesmos estudos realizados pelos autores da literatura, porém utilizando-se um código computacional comercial, aproveitando-se algumas das subrotinas prontas específicas, como é o caso dos modelos de transferência unidimensional e acoplando-as nesse algoritmo geral.

Ampliar o algoritmo para estudar escoamentos em sistemas mais complexos, como, por exemplo, a implementação de turbina num sistema de lagoas ou tanques de aeração com mais de um aerador mecânico.

Estudar gases com características ambientais relevantes, porém diferentes daqueles mencionados nesta tese. Desta forma poder-se-ia criar um banco de dados para os gases mais importantes, a fim de serem introduzidos no algoritmo e avaliar estudos de parâmetros físico-químicos e seus reflexos nos modelos de transferência de massa.

---

## VII - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRARDI, V.; ROVERO, G.; BALDI, G.; SICARDI, S.; CONTI, R. (1990) - Hydrodynamics of a gas-liquid reactor stirred with a multi-impeller system. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.68, Part A, p. 516-522, november.
- ADENEY, W. E.; BECKER, H. G. (1919) - The determination of the rate oxygen of solution of atmospheric nitrogen and oxygen by water, Part I. *Philosophical Magazine*. v.38, n.225, p. 317-337.
- ALÉM S<sup>o</sup>, P. A. (1981) - A influência da idade do lodo e das características hidráulicas do tanque de aeração no desempenho do processo de lodos ativados. Determinação dos parâmetros de crescimento biológico para esgoto predominantemente doméstico. São Paulo. 247 p. Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - USP.
- AMERICAN SOCIETY OF CIVIL ENGINEERS - ASCE. (1961) - Committee on Sanitary Engineering Research.
- AQUAJET (1976) - Aerador Mecânico FILSTAR. Catálogo 1/76 - C. Filsan. São Paulo. 15p.
- AQUAJET (1977) - Aerobic - Tratamento de Água e Esgoto - Conversão da taxa de transferência da água limpa para o esgoto. Catálogo 4-77B - FMB. Filsan. São Paulo. 22p.
- ARMFIELD, S. W. (1991) - Finite difference solutions of the Navier-Stokes equations on staggered and non-staggered grids. *International Computers & Fluids*, v.20, n.1, p. 1-17.
- ARRUA, L. A.; McCOY, B. J.; SMITH, J. M. (1990) - Gas-liquid mass transfer in stirred tanks. *AIChE Journal*. v.36. n.11, p. 1768-1772.
- ATLAS, E.; FOSTER, R.; GLAM, C. S. (1982) - Air-water exchange of high molecular weight organic pollutants: laboratory studies. *Environmental Science & Technology*, v.16, n.5, p. 283-286.
- BALLES, J. D.; HOLLEY, E. R. (1986) - Flume tests on hydrocarbon reaeration tracer gases. *Journal of Environmental Engineering*, v.112, n.4, p. 695-700.
- BARBOSA, A. R., Jr. (1989) - *Desenvolvimento de metodologia para a determinação do coeficiente de reaeração dos escoamentos naturais de água com o emprego de traçador gasoso*. São Carlos. 187 p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- BARBOSA, A. R., Jr. (1997) - *Uso de traçadores na determinação de parâmetros de qualidade em escoamentos naturais de água*. São Carlos. 457 p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- BARBOSA, A. R., Jr.; GIORGETTI, M. F. (1990) - Determinação do coeficiente de reaeração de corpos d'água com o emprego de etileno como traçador gasoso. In: ENCONTRO NACIONAL DE CIÊNCIAS TÉRMICAS, III, Associação Brasileira de Ciências Mecânicas, Itapanema, SC. *Anais*. p. 1085-1090.

- BARBOSA, A. R., Jr.; GIORGETTI, M. F. (1995) - Reaeração de corpos de água naturais: uma metodologia para a quantificação com o uso de traçadores (disquete). In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 18., Salvador, 1995. Anais. Rio de Janeiro, ABES. Disquete 8/9.
- BATES, L.; FONDY, P. L.; CORPSTEIN, R. R. (1963) - An examination of some geometric parameters of impeller power. *I & EC Process, Design and Development*. v.2, n.4, p. 310-314, october.
- BENNET, J. P.; RATHBUN, R. E. (1972) - Reaeration in open-channel flow. *Geological Survey Professional Paper 737*. United States Department of Interior, Washington, 75p.
- BICUDO, J. R. P. W. (1988) - *The measurement of reaeration in streams*. Newcastle. 306p. PhD Thesis. Department of Civil Engineering. University of Newcastle-upon-Tyne. Inglaterra.
- BICUDO, J. R. P. W.; JAMES, A. (1990) - The Measurements of reaeration in streams: comparison of techniques. *Journal of Environmental Engineering*, v.115, n.5. p.992-993, out.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHFOOT, E. N. (1960) - *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons Inc. 1º ed. New York. USA.
- BOTELHO, D. A.; MOREIRA, M. L. (1991) - *TURBO - Um programa computacional para análise de escoamentos bi-dimensionais de um fluido incompressível usando modelo de turbulência de duas equações*. Instituto de Engenharia Nuclear IEN - 01. Rio de Janeiro. 133 p.
- BOYSAN, F.; CLISFF, K. R.; LECKIE, F.; SCRAGG, A. S. (1988) - The growth of *Catharanthus roseus* in stirred tank bioreactors. In: 2ª INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOREACTOR FLUID MECHANICS. Ed. KING, R. Published on behalf of BHRA - *The Fluid Engineering Centre*. Paper E4, p. 245-258.
- BRAGA, W. (1992) - *Dinâmica dos Fluidos Computacional*. DEM, PUC - Rio de Janeiro. 149 p.
- BRASIL. (1990) - PORTARIA nº. 36/GM de 19/01/1990.
- CAKICI, A.; BOYLE, D. D. (1995) - Simultaneous of oxygen uptake rate and reaeration rate in an industrial wastewater treatment process. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.73, Part B, p. 132-136. may.
- CARREIRA, M. F. (1995) - *Relação entre coeficiente de absorção de massa  $K_l$  e parâmetros de turbulência superficial obtidos por método óptico*. São Carlos. 188p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo -USP.
- CHAO, A. C.; CHAMG, D. S.; SMALLWOOD Jr, C.; GALLER, W. S. (1987a) - Effect of temperature on oxygen transfer. *Journal of Environmental Engineering*. ASCE, v.113, n.4, p. 722-735, august.
- CHAO, A. C.; CHAMG, D. S.; SMALLWOOD Jr, C.; GALLER, W. S. (1987b) - Effect of temperature on oxygen transfer - laboratory studies. *Journal of Environmental Engineering*. v.113, n.5, p. 1089-1101, october.
- CHAPPLE, D.; KRESTA, S. (1994) - Effect of geometry on the stability of flow patterns in stirred tanks. *Chemical Engineering Science*. v.49, n.21, p. 3651-3660.

- CHURCHILL, M. A.; ELMORE, H. L.; BUCKINGHAM, R. A. (1962) - The prediction of stream reaeration rates. *American Society of Civil Engineering Journal*, v.88, n.SA-4, p. 1-47.
- CIRPKA, O.; REICHERT, P.; WANNER, O.; MÜLLER, R.; SCHWARZENBACH, R. P. (1993) - Gas exchange at river cascades: field and model calculations. *Environmental Science Technology*, v.27, n.10, p. 2086-2097.
- COHEN, Y.; COCCHIO, W.; MACKAY, D. (1978) - Laboratory study of liquid - phase controlled volatilization rates in presence of wind waves. *Environmental Science & Technology*, v.12, n.5, p. 553-558, may
- CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE. (1986) - Resolução do CONAMA nº 20/1986. Classificação dos Corpos de Água. Brasília-D.F.
- COSTA, O. S. (1997) - Desenvolvimento de metodologia para a determinação indireta do coeficiente de reaeração superficial de um corpo d'água com emprego do método da sonda solúvel. São Carlos. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP /no prelo/
- CUNHA, A. C. (1993) - *Transferência de gases em sistemas líquidos altamente agitados induzidos por hélices do tipo turbina em tanques cilíndricos*. São Carlos. 170 p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- CUNHA, A. C.; BARBOSA, A. R. Jr.; SCHULZ, H. E. (1994) - Absorção e dessorção de gases em corpos de água com aplicação à hidráulica ambiental. In: CONGRESSO LATINOAMERICANO DE HIDRÁULICA, XVI, Santiago, Chile, v.6, p. 313-324.
- CUTTER, L. A. (1966) - Flow and turbulence in a stirred tank. *AIChE Journal*, v.12, n.1, p. 35-45.
- DANKWERTS, P. V (1951) - Significance of liquid-film coefficients in gas absorption. *Industrial and Engineering Chemistry*, v.43, n.6, p.1460-1467.
- DAVIES, J. T. (1972) - *Turbulence Phenomena: an introduction to the eddy transfer of momentum, mass and heat, particularly at interfaces*. Academic Press. 1st Ed. New York 412 p.
- DAVIES, J. T.; LOZANO, F. J. (1984) - Turbulence and surface renewal at the clean surface of a stirred vessel. *AIChE Journal*, v.30, n.3, p. 502-504.
- DAVIES, J. T.; RIDEL, E. K. (1963) - *Interfacial Phenomena*. Academic Press. 2nd. Ed. New York and London, 480 p.
- DESOUZA, A.; PIKE, R. (1972) - Fluid dynamics and flows patterns in stirred tanks with a turbine impeller. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.50, p. 15-23. february.
- DI BERNARDO, L. (1993) - Características Químicas das Águas. In: *Métodos e Técnicas de Tratamento de Água*. Rio de Janeiro. VI ABES, 496 p.
- DICKEY, D. S.; HEMRAJANI, R. R. (1992) - Recipes for fluid mixing. *Chemical Engineering*. A McGraw-Hill Publication, march.
- DILLING, W. L. (1977) - Interphase transfer processes II. Evaporation rates of chloro methanes, ethanes, ethylenes, propanes and propylenes from dilute aqueous solutions. Comparison with theoretical predictions. v.11, n.4, p. 405-409.

- DJEBBAR, R.; ROUSTAN, M.; LINE, A. (1996) - Numerical computation of turbulent gas-liquid dispersion in mechanically agitated vessels. *Institution of Chemical Engineers. IChemE. Part A*, v.74, n.A4, may.
- DOBBINS, W. E. (1956) - *The nature of the oxygen transfer coefficient in aeration systems, in biological treatment of sewage and industrial wastes*. Ed. McCabe, B.J. and Eckenfelder Jr. W. W. Reinhold Publishing Corporation, New York. p. 141-149.
- DOBBINS, W. E. (1964a) - BOD e oxigen relationships in streams. *Journal of the Sanitary Engineering Division, ASCE*, v.90, n.SA3, p. 53-78, jun.
- DOORMALL, J. P.; RAITHY, G. D. (1984) - Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer*. v.7, p. 147-163.
- EIGER, S. (1990) - Simulação de escoamento uniforme em canais de seção composta com modelos de turbulência. In: XIV CONGRESSO LATINO AMERICANO DE HIDRÁULICA. Division Regional Latinoamericana de la Asociación Internacional de Investigaciones Hidráulicas. Montevideo, Uruguai. *Anais*, v.1, p. 61-71.
- EIGER, S.; SHEN, H. W. (1997) - An analysis of the free surface boundary condition of the dissipation rate of turbulence kinetic energy. /no prelo/
- EISENREICH, S. J.; ACHMAN, D.; HORNBUCKLE; BAKER, J. E. (1991) - Volatilization of PCBs from the great lakes. In: Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 400-412.
- ELMORE, H. L.; WEST, W.F. (1961) - Effect of water temperature on stream reaeration. *Committee on Sanitary Engineering Research. 31<sup>st</sup> Progress Report Journal of the Sanitary Engineering Division*, v.87, n.SA6, p. 59-71, november.
- FORT, I. (1986) - Flow and turbulence in vessels with axial impellers.. In: UHL, V. W. & GRAY, J. B. *Mixing: Theory and Practice*, v.III, p. 133-195.
- FORTSCUE, G. E.; PEARSON, J. R. A. (1967) - On gas absorption into a turbulent fluid. *Journal of Chemical Engineering Science*. v.22, p. 1163-1176.
- FRANKS, R. G. E. (1972) - *Modelling and simulation in chemical engineering*. A Wiley-Interscience. New York, 411p.
- FREIRE, J. A. (1985) - *Crescimento do Metarrhizium anisopliae (METSCH) sorokin sob influência das variáveis: temperatura, superfície de aeração e concentração de glicose*. Dissertação (Mestrado) - Faculdade de Ciências Farmacêuticas. Área de Tec. de Fermentação. Universidade de São Paulo - USP. São Paulo. 126 p.
- FRIEDMAN, B. F.; BLANC, F. C. (1991) - Measurements of stream reaeration rate coefficients using propane gas. In: Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. and GULLIVER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 322-332.
- GAMESON, A. L. H.; TRUESDALE, G. A.; DOWNING, A. L. (1955) - Reaeration studies in a Lackland Beck. *Journal of Institution of Water Engineers*, v.9, n.7, p. 571-594.
- GIBBON, D. L. (1974) - *Aeration of sludge in sewage treatment*. Pergamon. Ferro Corporation. 118 p.
- GIORGETTI, M.F.; SCHULZ, H. E. (1990) - Sobre o método da sonda solúvel flutuante para a determinação indireta do coeficiente de reoxigenação superficial em corpos de

água. In: ENCONTRO NACIONAL DE CIÊNCIAS TÉRMICAS, III, Associação Brasileira de Ciências Mecânicas. Itapanema, SC. *Anais*, p. 1079-1084.

- GIORGETTTI, M. F.; GIANSANTI (1983) - Avaliação do nível de turbulência em águas correntes e sua correlação com o coeficiente de reaeração superficial. In: CONGRESSO DA ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL (ABES), XII, Camboriú, S.C., novembro.
- GOSMAM, A. D.; LAUNDER, B. E.; REECE, G. J. (1985) - *Computer-aided engineering: heat transfer and fluid flow*. Ellis Horwood series in mechanical engineering. 1st. Ed. 179p.
- GOSMAM, A. D.; PUN, W. M.; RUNCHAL, A. K.; LAUNDER, D. B.; WOLFSHTEIN, M. (1969) - *Heat and mass transfer in recirculating flows*. Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science and Technology. London. Academic Press - London and New York. 338 p.
- GULLIVER, J. S. (1991) - Introduction to the air-water mass Transfer. In: Air-water Mass Transfer, 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE, New York, p. 1-7.
- GÜNKEL, A. A.; WEBER, M. E. (1975) - Flow phenomena in stirred tanks, part - I: the impeller stream. *AIChE Journal*. v.21, n.5, p. 931-949.
- HANEY, P. D. (1954) - Theoretical principles of aeration. *Journal AWWA*, p. 353-376.
- HANRATY, J. T. (1991) - Effect of gas flow on physical absorption. In: Air-water Mass Transfer, 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 10-31.
- HARLOW, F. H.; WELCH, J. E. (1965) - Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*. v.8, n.12, p. 2182-2189, december.
- HARNBY, N.; EDWARDS, M. F. E.; NIENOV, A. W. (1985) - *Mixing in the process industries*. Butterworth, *Series in Chemical Engineering*, London. 375 p.
- HARVEY, P. S.; GREAVES, M. (1982a) - Turbulent flow in agitated vessel, part - I: a predictive model. *Transactions IChemE*, v.60, p. 195-200.
- HARVEY, P. S.; GREAVES, M. (1982b) - Turbulent flow in agitated vessel, part - II: numerical solution and models predictions. *Transactions IChemE*, v.60, p. 195-200.
- HELOU, L. C. (1994) - Acoplamento das equações da hidrodinâmica às da dispersão de poluentes. São Paulo. 170p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - USP.
- HIGBIE, R. (1935) - The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. *Journal of American Inst. Chem. Engineers Trans*, v.31, p. 365-390.
- HINES, A. L.; MADDOX, R. N. (1985) - *Mass Transfer: Fundamentals and Applications*. Prentice-Hall, Inc. New Jersey, EUA. 542 p.
- HINZE, J. O. (1959) - *Turbulence: an introduction to its mechanism and theory*. McGraw-Hill. 589 p.
- HOLLEY, E.R.; YOTSUKURA, N. (1984) - Field techniques for reaeration measurements in rivers. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS

- TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca. Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 381-401.
- HOLLEY, E.R.; DOWNER, C.W.; WARD, G. H. (1991) - Tracer gas transfer technique for shallow bays. In: Air-water Mass Transfer, - 2st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 234-243.
- HOVIS, J. S.; McKEOWN, J. J.; KRAUSE Jr.; BENSON, B. B.(1984). - Gas transfer rate coefficient measurement of wastewater aeration equipment by a stable isotope krypton/lithium technique. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1ST INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca. Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 403-412.
- HSIEH, C.; RO, K. S.; STRENTOM, M. K. (1993) - Stimating emissions of 20 VOCs. I: surface aeration. *Journal of Environmental Engineering*, v.119, n.6. p. 1077-1097, nov-dec.
- HSU, YC.; HUANG, CJ.; CHIANG, KP. (1997) - A correlation og mixing an agitated tank with gas induction. *Journal of Chemical Engineering of Japan*. v. 30, n.5, p. 819-969.
- IBRAHIM, S.; NIENOW, A. W. (1995) - Power curves and flow patterns for a range of impellers in newtonian fluids:  $40 < Re < 5 \times 10^5$ . *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.73, Part A, p. 485-491, july.
- ISAACS, W. P.; GAUDY Jr. A. F. (1968) - Atmospheric oxygenation in a simulation stream. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, ASCE, v.94, n.SA2, p. 319-344, april.
- ISMAILOV, M.; SHCEFER, M.; DURST, F.; KURODA, M. (1997) - *Journal of Chemical Engineering of Japan*. v. 30, n.6, p. 1090-1097.
- IVERFELD, A.; LINDQUIST, O. (1984) - The transfer of measuring at the air-water interface. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES. BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H. eds., Ithaca. Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 533-538.
- JAWORSKI, Z.; NIENOW, A. W.; KOUTSAKOS, E.; DYSTER, K.; BUJALSKI, W. (1991) - A study of turbulent flow in a baffled vessel agitated by a pitched blade turbine. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v. 69, Part A, p. 313-320, july.
- JENSEN, N. A. (1991) - Effect of temperature on gas transfer at low surface renewal rates. In: Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 106-115.
- JIRKA, G. (1991) - Gas transfer process at the air-water interface. in *Environmental Hydraulics*, Lee & Cheung, eds., Proc. of the International Symposium on Environmental Hydraulics, Balkema Rotterdam. p. 357-370.
- JIRKA, G. H.; CHU, C. (1993) - Surface gas transfer and turbulence structure in combined wind/bottom shear flow regimes. In: ADVANCES IN HYDRO-SCIENCE AND ENGINEERING, WANG, S. Y. ed., Proc. of the First International Conference on Hydro-science and Engineering. University of Mississippi, v.1, p. 114-121.
- JOSHI, J. B.; PANDIT, A. B.; SHARMA, M. M. (1982) - Review Article Number 7: Mechanically agitated gas-liquid reactors. *Journal of Chemical Engineering Science*, v. 37, p. 813-844.

- KALINSKE, A. A. (1968) - Surface "aerators" for absorption and desorption of gases into water and liquid wastes. *Water & Sewage Works*, p. 33-37.
- KALINSKE, A. A. (1968) - Surface "aerators" for absorption and desorption of gases into water and liquid wastes. *Water & Sewage Works*, p. 33-37.
- KAWASE, Y.; ARAKI, T.; SHIMIZU, K.; MIURA, H. (1997) - Gas-liquid mass transfer in three-phase stirred tank reactors: newtonian fluids. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.75, p. 1159-1164, december.
- KHALIL, E. E., SPALDING, D. B. e WHITELAW, J. H. (1975) - The calculation of local flow properties in two-dimensional furnaces. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, v.18, p. 775-791.
- KILPATRIK, F. A.; RATHBUN, R. E.; YOTSUKURA, N.; PARKER, G. W.; DELONG, L. L. (1989) - Determination of stream reaeration coefficients by use of tracers. *United States Geological Survey*. v.3, Chapter A18. Denver. USA. p. 1-52.
- KING, C. J. (1966) - Turbulent liquid phase mass transfer at free gas-liquid interface. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*. v.5, n.1, p.1-8.
- KING, D. B.; BRYUN, W. J.; ZHENG, M.; SALTZMAN, E. S. (1995) - Uncertainties in the molecular diffusion coefficient of gases in water for use in estimation of air-sea exchange. In: *Air-water Gas Transfer. III INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON AIR-WATER GAS TRANSFER*, JÄHNE, B. & MONAHAN, E. C, eds., p. 4-13.
- KISHINEVSKY, M. Kh. (1955) - Two approaches to theoretical analysis of absorption process. *Journal of Applied Chemistry, U.S.S.R.*, n.28, p. 881-886.
- KISHINEVSKY, M. Kh.; SEREBRIANSKY, V. T. (1955) - The mechanism of mass transfer at the gas-liquid interface with vigorous stirrings, *Journal of Applied Chemistry, U.S.S.R.*, n.29, p. 29-33.
- KOJIMA, S. (1988) - *Artificial aeration circulation*. In *Limnologia e Manejo de represas. Série Monografias em Limnologia*. TUNDISI, J. G. ed., USP. v.I, Tomo 2. p-145-181.
- KOMORI, S., HIRAGA, Y., MURAKAMI, Y.; UEDA, H. (1988) - The generation of surface-renewal eddies in an open channel flow. In: *Transport Phenomena in Turbulent Flows: Theory, Experiment and Numerical Simulation*, HIRATA, M. & KASAGI. eds., Hemisphere Publishing Corporation, New York. p. 213-224.
- KOZINSKY, A. A.; KING, C. J. (1966) - The Influence of diffusivity on liquid phase mass transfer to the free interface in stirred vessel. *Association International Chemical Engineering Journal, AIChE*, v.12, n.1, p. 109-116, jan.
- KRENKEL, P. A.; ORLOB, G.T. (1962) - Turbulent diffusion and reaeration coefficient. *Journal of Sanitary Engineering Division. ASCE*, v.88, n.SA2, part I, p. 53-83, mar.
- KRESTA, S. M.; WOOD, P. E. (1991) - Prediction of the three-dimensional turbulent flow in stirred tanks. *AIChE Journal*, v.37, n.3, p. 448-460.
- KRESTA, S. M.; WOOD, P. E. (1993) - The flow field produced by a pitched blade turbine: characterization of the turbulence and estimation of dissipation rate. *Chemical Engineering Science*, v.48, n.10, p. 1761-1774.
- KUNCEWICZ, C. (1992) - Three-dimensional model of laminar-liquid flow for paddle impellers and flat-blade turbines. *Chemical Engineering Science*. v.47, n.15-16. p. 3959-3967.

- KUO, J. (1984) - Estimation of volatilization of toxics for multimedia modelling. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 598-595.
- LAI, C. J.; YEN, C. W. (1993) - Turbulent free surface flow simulation using a multilayer model. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. v.16. p. 1007-1025.
- LAKSHMINARAYANA, B. (1986) - Turbulence modeling for complex shear flows. *AIAA journal*, v.24, n.12, p. 1900-1917.
- LANGBEIN, W. B.; DARUM, W. H. (1967) - The aeration capacity of streams. *United States Geological Survey, Circ. 542*. 6p.
- LAU, Y. L.; KRISHNAPPAN, G. (1983) - Ice cover effects on stream flows and mixing. *Journal of Hydraulics and Engineering*. p. 1225-1242.
- LAUFHÜTTE, H. D.; MERSMANN, A. (1987) - Local energy dissipation in agitated turbulent fluids and its significance for design of stirring equipment. *Chemical Engineering Technol.* v.10. p. 56-63.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. (1972) - *Mathematical models of turbulence*. Academic Press. London and New York. 169 p.
- LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. (1974) - The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. North-Holland Publishing Company, v. 3, p. 269-289.
- LEEDWELL, J. (1984) - The variation of gas transfer with molecular diffusivity. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES. BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 284-293.
- LESCHZINER, M. A. (1980) - Practical evaluation of three finite difference schemes for the computational of steady-state recirculating flows. *Computer Meth. In Applied Mechanics and Engineering*. v.23, p. 293-312.
- LEWIS, W. K.; WHITMAN, W. G. (1924) - Principles of gas absorption. *Industrial and Engineering Chemistry*. v.16, n.12, p. 825-833.
- LILLEY, D. G. (1976) - Primitive pressure-velocity code for the computation of strongly swirling flows. *AIAA Journal*. v.14, n.6, p. 749-756, june.
- LINCOFF, A. H.; GOSSET, J. M. (1984) - The determination of Henry's constant for volatile organics by equilibrium partitioning in closed systems. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H. eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 17-26.
- LISS, P. S.; SLATER, P.G. (1974) - Fluxes of gases across the air-water interface. *Nature*, 247: p. 181-184, january.
- LIST, J. F. ed. (1988) - TASK COMMITTEE ON TURBULENCE MODELS IN HYDRAULIC COMPUTATION - Special Issue. In: *Hydraulic Engineering*, v.114, n.9. p. 969-1052, september.
- LJUBISAVLJEVICK, D. (1984) - Carbon dioxide desorption from the activated sludge at the waste water treatment plants. In: Gas Transfer at Water Surfaces 1st INTERNATIONAL

- SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 613-620.
- LUNG, W. S. (1993) - Water quality modeling. Application to Estuaries. v.III, Series Editoras. CRC Press. Boca Raton, Florida, EUA. 194 p.
- LUZ, D. (1996) - Acordo Comercial Contraria Lei Nacional de Agrotóxicos. *Jornal do CONFEA*, Ano 2, n.14, p. 4-5, nov-dez
- MACKAY, D.; LEINOLEN, P. J. (1975) - Rate of evaporation of low solubility contaminants from water bodies to atmosphere. *Environmental Science & Technology*, v.9, n.13, p. 1178-1180, dez.
- MACKAY, D.; SHIU, W. Y. (1984) - Physical-chemical phenomena and molecular properties. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 3-16.
- MACKAY, D.; SHIU, W. Y.; VALSARAJ, K. T.; THIBODEAUX, L. J. (1991) - Air-water transfer: the role or partitioning. In: Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S., eds., ASCE. New York, p. 4-13.
- MACKAY, D.; YEUN, A. T. K. (1983) - Mass transfer coefficient correlations for volatilization of organic solutes from water. *Environmental Science & Technology*, v.17, n.4, p. 211-217.
- MALISKA, C. R. (1985) - Volumes finitos para a solução de problemas que envolvem escoamento de fluidos. In: 8º CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL. Florianópolis. 76p.
- MALISKA, C. R. (1995) - *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. Fundamentos e coordenadas generalizadas*. LTC Livros Técnicos e Científicos Editora AS, Rio de Janeiro. 424 p.
- MANN, R. (1986) - Gas-liquid stirred vessel mixers: towards a unified theory based on networks-of-zones. *Chemical Engineering Res. Des.*, v.64, p. 23-34, january.
- MANNING, F. S.; WILHELM, R. H. (1963) - Concentration fluctuations in a stirred baffled vessel. *AIChE Journal*, v.9, n.12, p. 12-19, january.
- MANUAL DO AERADOR PROPULSAR (s/d) - Aerador Rápido Propulsar. Propulsar News N. 958 - ECOSAN Equipamentos para Saneamento LTDA. São Bernardo do Campo - SP.
- MAO, DM.; FENG, LF.; WANG, K. e LI, YL. (1997) - The mean flow field generated by a pitched blade turbine: changes in the circulation pattern due to impeller geometry. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. v.75, p. 307-316, april.
- MARKATOS, N. C. (1986) - *The mathematical modelling of turbulent flow*. Applied Math. Modelling, p. 190-220, June.
- MATTER-MÜLLER, C.; GUJER, W.; GIGER, W. (1981) - Transfer of volatile substances from water to the atmosphere. *J. Water Res.*, v.15, n.11, p.1271-1279.
- McAULIFFE, C. (1966) - solubility in water of paraffin, cicloparaffin, olefin, acetylene, cicloolefin and aromatic hydrocarbons. *Journal of Physical Chemistry*. v.70, n.4, p. 1267-1275, april.

- McCRACKEN, D. D.; SALMON, W.I. (1988) - *Computing for engineers and scientists with FORTRAN\_77*. 2nd. Edition. John Wiley & Sons, Inc. New York, 730 p.
- McCUTHEON, S. C.; FRECH, R. H. (1989) - *Water quality modeling: transport and surface exchange in rivers*. v. 1. Series Editoria. CRC Press, Inc. Boca Raton, Florida. EUA. 334 p.
- McDONALD, J.P.; GULLIVER, J. S. (1991) - Methane tracer technique for gas transfer at hydraulic structures. In: *Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES*, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S., eds., New York, ASCE. p. 267-277.
- McGUIRK, J. J. e PALMA, M. L. M. (1993) - The efficiency of alternative pressure-correction formulation for incompressible turbulent flow problems. *International Computers & Fluids*, v.22, n.1, p. 77-87.
- MEER, A. B.; BEENACKERS; A. A. C. M.; BURGHARD, R.; MULDER, N. H.; FOK, J. J. (1992) - Gas-liquid mass transfer in a four-phase stirred fermentor: effects of organic phase hold-up and surfactant concentration. *Chemical Engineering Science*. v.47, n.9-11. p. 2369-2374.
- METCALF; EDDY, INC. (1985) - Aeradores Mecanicos. In: *Ingeniería Sanitaria. Tratamiento, evacuación y reutilización de aguas residuales*. 2th Edition, Universidad de California, Davis, p.545-550.
- METZGER, I. (1968) - Effects of temperature on stream aeration. *Journal of the Sanitary Engineering Division*, v.94, n. SA6, p. 1153-1159, december.
- MIDDLETON, J. C.; LYNCH, P. M. (1986) - Computation of flow fields and complex reaction yielded in turbulent stirred reactors, and comparison with experimental data. *Chemical Engineering Res. Des.* v.64, p. 18-22, january.
- MINER, E. W.; SWEN Jr.; T. S. HANDLER, R. A.; LEIGHTON, R. (1991) - Examination of wall damping for the  $\kappa - \varepsilon$  turbulence model using direct simulations of turbulent channel flow. *Int. J. Numerical Methods in Fluids*, v.12, p. 609-624.
- MIYAMOTO, S. (1932a) - A theory of rate of solution of gas into liquid. *Chemical Society Japan Bull*, v.7, p. 8-17.
- MIYAMOTO, S (1932b) - The rate of solution of gas into liquid containing a reacting substance, and a kinetic derivation of distribution law, part II. *Chemical Society Japan Bull*, v.7, p. 388-398.
- MOMESSO, A. M. (1996) - *Absorção e dessorção de gases através da interface ar-água em sistemas de agitação mecânica*. São Carlos. 145 p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- MOMESSO, A. M.; CUNHA, A. C.; SCHULZ, S. A.; SCHULZ, H. E. (1996) - Absorção de oxigênio e dessorção de gases orgânicos pela água. In: 6° BRAZILIAN CONGRESS OF ENGINEERING AND THERMAL SCIENCES - 6° LATIN AMERICAN CONGRESS OF HEAT AND MASS TRANSFER. Florianópolis, SC-Brazil, v.II, p. 267-277, november.
- MUJUNDAR, A. S.; HUANG, D., WOLF, WEBER, M. E.; DOUGLAS, J. M. (1970) - Turbulence parameters in a stirred tank. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. v.48, p. 475-483.

- MYNKOWYCZ, W. J.; SPARROW, E. M.; SCHNEIDER, G. E.; PLETCHER, R. H. (1988) - *Handbook of Numerical Heat Transfer*. Editora Willey and Interscience. New York. 1024 p.
- MYONG, H. K.; KASAGI, N. (1990) - A new approach to the improvement of  $\kappa - \varepsilon$  model for wall-bounded shear flows. *JSME International Journal*. Series II, v.33, n.1. p. 63-72.
- NAGATA, J. M. A. (1972) - Flow model in cylindrical mixing vessel. p. 1-63.
- NAGATA, J. M. A. (1975) - *Mixing - Principles and applications*. Kodansha LTD e John-Willey & Sons, Inc. 458 p.
- NAOT, D.; RODI, W. (1982) - calculation of secondary current in channel flow. *Journal of Hydraulic Division*, v.108, p. 948-967.
- NEGULESCU; ROJANSKY, (1969) - Recent research to determine reaeration coefficient. *Journal of Water Research, LAWPRC*, v.3, n.3, p. 189-202.
- O'CONNOR, D. J. (1984) - Turbulent transfer across smooth and rough surfaces. In: *Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES* BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 321-331.
- PARKER, G. W.; GAY, F. B. - (1987) - A procedure for estimating reaeration coefficients for Massachusetts streams. *United States Geological Survey. Water-Resources Investigations Report 86-4111*, Boston/Massachusetts. 34 p.
- PATANKAR (1979a) - A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations, num. heat transfer. v.2.
- PATANKAR, S. V. (1980) - *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere, Washington, D. C. 179p.
- PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. (1972) - A calculation procedure for heat, mass, and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. v.15, p. 1787-1806.
- PATEL, M.; CROSS, M.; MARKATOS, N. C.; HACE, A. C. H. (1987) - An evaluation of eleven discretization schemes for predicting flow and heat transfer in supersonic jets. *Int. J. Heat and Mass Transfer*. v.30, n.9, p. 1907-1925.
- PERIC', M. (1985) - *A finite volume method for prediction of three-dimensional fluid flow in ducts complex*. London. 299p. PhD Tesis. Imperial College of Science and Technology University.
- PERIC', S. O.; SHEUERER, G. (1988) - Finite volume calculations of high Reynolds number backward facing step flow employing a colocated variable arrangement. In: *INTERNATIONAL SYMPOSIA ON TRANSPORT PHENOMENA: Theory, Experiment and Numerical Simulation*, Hirata & Kasagi, eds. Proceedings, Tokyo, p. 633-648.
- PERRY, R. H.; CHILTON. C. H. (1985) - *Manual de Engenharia Química*. 5ª Ed. Rio de Janeiro. Guanabara Dois. 1835 p.
- PLACEK, J.; TAVLARIDES, L. L. (1985) - Turbulent flow in stirred tanks, part - I: turbulent flow in the turbine impeller region. *AIChE Journal*. v.31, n.7, p. 1113-1120.
- PLATE, E.; STHALSCHMIDT, T.; SCHULZ, M. E.; DANNEKER (1995) - The influence of air-sea exchange on the partitioning of N-species during transport over sea. In: *Air-*

- water Gas Transfer. III - INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON AIR-WATER GAS TRANSFER, JÄHNE, B. & MONAHAN, E. C, eds., p. 735-744.
- RAINWATER, K. A.; HOLLEY, E. (1983) - Laboratory studies on the hydrocarbon gas tracer technique for aeration measurements. University of Texas Center for Research in Water Resources. *Technical Report*. CRWR-189. Bureau of Engineering Geological Survey - Texas. EUA. 114 p, december.
- RAITHBY, G. D.; SCHNEIDER, G. E. (1979) - Numerical solution of problems in incompressible fluid flow: treatment of the velocity-pressure coupling. *Numerical Heat Transfer*. v.2, p. 417-440.
- RANADE, V. V. (1997a) - Improve reactors via CFD. *Chemical Engineering*. The McGraw-Hill Companies, p. 96-102, may.
- RANADE, V. V. (1997b) - An efficient computational model for simulating flow in stirred vessels: a case of Rushton turbine. *Chemical Engineering Science*, v.52, n.24, p. 4473-4484.
- RANADE, V. V.; DOMMETI, S. M. S. (1996b) - Computational snapshot of flow generated by axial impellers baffed stirred vessels. *Institution of Chemical Engineering*, v.74, part A, p. 476-484, may.
- RANADE, V. V.; JOSHI J. B. (1989a) - Flow generated by pitched blade turbines - I: Experimental. *Chemical Engineering Communications*, v. 81, p. 197-224.
- RANADE, V. V.; JOSHI J. B. (1989c) - Flow generated by a disc turbine: Part I Experimental. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*, v. 68, Part A, p. 19-33, january.
- RANADE, V. V.; JOSHI J. B.; MARATHE, A. G. (1989b) - Flow generated by pitched blade turbines - II: Simulation using  $\kappa$ - $\epsilon$  model.. *Chemical Engineering Communications*, v. 81, p. 225-248.
- RANADE, V. V.; JOSHI J. B.; MARATHE, A. G. (1989d) - Flow generated by a disc turbine: Part II. Mathematical modelling and comparison with experimental data. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.68, Part A, p. 34-50, january.
- RANADE, V. V.; JOSHI, J. B. (1990a) - Flow generated by a disc turbine: part I experimental. *Trans ICHemE*, v.68, part A, january.
- RANADE, V. V.; JOSHI, J. B. (1990b) - Flow generated by a disc turbine: part II Mathematical modelling and comparison with experimenty data. *Trans ICHemE*, v.68, part A, january.
- RANADE, V. V.; MISHRA V. P.; SARAPH, V. S.; DESPHANDE, G. B.; JOSHI, J. B. (1992) - Comparison of axial flow impellers using a laser doppler anemometer. *Industrial end Engineering Chemical Resource*. v.31, n.10, p. 2370-2379, oct.
- RASHID, M.; HETSRONI, G.; BANERJEE, S. (1991) - Mechanisms of heat and mass transport at gas-liquid interfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 34, n. 7, p. 1799-1810.
- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. - (1984) - Volatilization of clorinated hydrocarbons from water. In: Gas Transfer at Water Surfaces - BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., International Symposium on Gas Transfer at Water Surfaces. 1st., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 27-34.

- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. - (1987) - Volatilization of ethylene dibromide from water. *Env. Sci. Technol.* . V. 21, N. 3, p. 248-252.
- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. - (1987a) - Volatilization of ethylene dibromide from water. In: *Environmental Science & Technology*, v.21, n.3, p. 248-252.
- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. (1981) - Techniques for determining the volatilization coefficients of priority pollutants in streams. *Water Research*, v.15, n2, p.243-250.
- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. (1982) - Volatilization of organic compounds from streams. *Journal of the Environmental Engineering Division. ASCE*, v.108, n.EE-5, p. 973-989, out.
- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. (1983) - Gas-film coefficients for streams. *Journal of Environmental Engineering - ASCE*, v.109, n.5, p. 1111-1127, oct.
- RATHBUN, R. E.; TAI, D. Y. (1987b) - Volatilization rates of organic chemicals of public health concern. *Journal of Environmental Engineering*, v.113, n.5, oct..
- RATHBUN, R. E.; STEPHENS, D. W.; SCHULZ, D.; TAY, D. Y. (1978) - Laboratory studies of gas tracers for reaeration. *Journal of the Environmental Engineering Division. ASCE*, v.104, n.EE-2, p. 215-229, abr.
- RATHBUN, R. E.; STEPHENS, D. W.; SCHULZ, D.; TAY, D. Y. (1980) - Clousre on Laboratory studies of gas tracers for reaeration. *Journal of the Environmental Engineering Division. ASCE*, v.106, n.EE-3, p. 663-670.
- REID, R.C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. (1977) - *The properties of gases and liquids*. Mc-Graw-Hill Book Company, 3rd. edition, 688p.
- REY, A. B. (1970) - Agitação e Mistura. In: *Química Tecnológica Fundamental (Físico-Química Modernas)*. v.V, ed. Fortaleza. São Paulo.
- RIDAL, J. J.; KERMAN, B.; DRENNAN, W. (1995) - Estimating air-water transfer of hexachlorocyclohexanes in lake Ontario. In: JANHE & MONAHAN, p. 753-761.
- RIET, V. K.; BRUIJN, W.; SMITH, J. M. (1976) - Real and pseud-turbulence in the discharge stream from a Rushton turbine. *Chemical Engineering Science*. v.31, p. 407-412.
- RIET, V. K.; SMITH, J. M. (1975) - The trailing vortex sistem produced by Rushton turbine agitators. *Chemical Engineering Science*, v.30, p. 1093-1105.
- ROACHE, P. J. (1982) - Computational fluid dynamics. Hermosa Publishers. New Mexico. EUA. 446 p.
- ROBERTS, P. V. (1984) - Dependence of oxygen transfer rate on energy dissipation during surface aeration and in stream flow. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 347-355.
- ROBERTS, P. V.; DÄNDLIKER, P. V. (1983) - Mass transfer of volatile organic contaminants from aqueous solutions to the atmosphere during surface aeration. *Journal of Environmental Science and Technology*, v.17, n.8, p. 484-489.
- ROBERTS, R. M.; GRAY, M. R.; THOMPSON, B.; KRESTA, S. M. (1995) - The effect of impeller and tank geometry on circulation time distributions in stirred tanks. *Transactions of Institutions of Chemical Engineering*. v.73, Part A, p. 78-86, january.

- RODI, W. (1984) - Turbulence Models and Their Application in Hydraulics - A State of the Art Review. 2a. Ed. Karlsruhe, Republic of Germany.
- RODI, W.; MAJUNDAR, S.; SCHÖNUNG, B. (1989) - Finite-volume methods for two-dimensional incompressible flows with complex boundaries. In: 8<sup>A</sup> INTERNATIONAL CONFERENCE ON COMPUTING METHODS IN APPLIED SCIENCE AND ENGINEERING, Versaille. p. 369-392.
- ROLDÃO, J. M. P.; SOARES, J. H.; WROBEL, L. C.; BÜGE, T. R.; DIAS, N. C. L. (1991) - *Pollutant transport studies in the Paraíba do Sul rivers, Brazil*. In: *Water Pollution, Modeling, Measure and Prediction*, WROBEL, L. C. & BREBBIA, C. A., eds., Computational Mechanics Publications and Elsevier Applied Science. p. 167-178.
- ROMA, W. N. L. (1995) - Surface deformation measurement with optical sensor and correlation with reaeration coefficient. In: THIRD INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON AIR-WATER GAS TRANSFER. Heidelberg University, p.571-576, july.
- ROMA, W.N.L. (1988) - *Medida dos parâmetros de turbulência superficial e sua correlação com o coeficiente de reaeração*. São Carlos. 62 p. Tese (Livre Docência) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- RUNCHAL, A. K. (1972) - Convergence and accuracy of three finite difference schemes for a two-dimensional conduction and convection problem. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. v.4, p. 541-550.
- SAEKI, K.; KUME, T.; OHTAGUCHI, K.; KOIDE, K. (1992) - Effects of aeration rate and preculture age on batch growth of *tripterigium wilfordii* in bubble-column bioreactors. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, v.25, n.2, , p. 226-228, april.
- SCHULZ, H. E. (1985) - *Investigação do mecanismo de reoxigenação da água em escoamento e sua correlação com o nível de turbulência junto à superfície - I*. São Carlos. 299 p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- SCHULZ, H. E., BARBOSA Jr., A. R.; SCHULZ, S.A.G.; KREGBS, P. (1993) - A Review of gas transfer at water surfaces Sanitary Engineering and Environmental quality. In: ADVANCES IN HYDRO-SCIENCES AND ENGINEERING, WANG, S. Y. ed., University of Mississippi, p. 323-328.
- SCHULZ, H. E.; SCHULZ, S.A.G (1991) - Modeling below-surface characteristics in water reaeration, In: *Water Pollution, Modeling, Measurement and Prediction*, WROBEL, L. C. & BREBBIA, C., A. eds., Computational Mechanics Publications and Elsevier Applied Sciencies. p. 441-454.
- SCHULZ, H.E. (1990) - *Investigação do mecanismo de reoxigenação da água em escoamento e sua correlação com o nível de turbulência junto à superfície - II*. São Carlos. 865p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- SCHULZ, H.E., BICUDO Jr.; BARBOSA Jr, A.R.; GIORGETTI, M.F. (1991) - Turbulent water aeration: analytical approach and experimental data In: *Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES*, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE, New York, p. 142-155.
- SCHULZ, H.E.; GIORGETTI, M.F. (1991) - Measurement of Reaeration Coefficient with the Soluble Prople. In: *Air-water Mass Transfer - 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM*

- ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 278-293.
- SCHULZ, H.E.; SCHULZ, S.A.G. (1992) - Water aeration: an approach for the near-surface region. In: INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN WATER RESOURCES, IX, Proceedings, Denver, U.S.A., June.
- SIQUEIRA, E. Q. (1996) - Aplicação do modelo de qualidade de água (QUAL2E) na modelação de oxigênio dissolvido no Rio Meia Ponte (GO). São Carlos. 90 p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- SMITH, J. H.; BOMBERGER Jr, D. C.; HAYNES, D. L. (1980) - Prediction of the volatilization rates of high-volatility chemicals from natural water bodies. *Environmental Science & Technology*. v.14, n.11, p. 1332-1337, November.
- SMITH, J. M. (1990) - Industrial needs for mixing research. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.68, Part A, p. 3-6, January.
- SMITH, T. J.; RIELLY, C. D. (1988) - Predictions of the flow in fermenters and the implications for scale-up. In: 2nd INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOREACTOR FLUID MECHANICS. Ed. KING, R. Published on behalf of BHRA - The Fluid Engineering Centre. Paper C3, p. 431-441.
- SOUSA Fº, F. A. (1995) - Modelação numérica da hidrodinâmica em canais utilizando modelos de turbulência. São Carlos. 155p. Dissertação (Mestrado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo - USP.
- SPALDING, D. B. (1972) - A novel finite difference formulation for differential expressions involving both first and second derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. v.4, p. 551-559.
- STAMOU, A. I. (1991) - On the prediction of flow and mixing in settling tanks using a curvature - modified -  $\kappa$  -  $\epsilon$  model. *Applied Math. Modelling*, v.15, p. 351-358, July.
- STENBERG, O.; ANDERSSON, B. (1988) - Gas-liquid mass transfer in agitated vessels - I. Evaluation of the gas-liquid mass transfer coefficient from transient-response measurements. *Chemical Engineering Science*. v.43, n.3, p. 719-724.
- STENBERG, O.; ANDERSSON, B. (1988) - Gas-liquid mass transfer in agitated vessels - II. Modelling of gas-liquid mass transfer. *Chemical Engineering Science*. v.43, n.3, p. 725-730.
- STREETER, H. W. (1926) - The rate atmospheric reaeration of sewage polluted streams. *Trans. Am. Soc. Civ. Eng.* v.89, n.1351.
- STREETER, H. W.; PHELPS, E. B. (1925) - Study of the pollution and purification of the Ohio river. *Public Health Bulletin 146*, United States, Public Health Service, Washington.
- STREETER, H. W.; WRIGHT, C. T.; KEHR, R. W. (1936) - An experimental study of atmospheric reaeration under stream-flow conditions, Part III of measures of natural oxidation in polluted streams. *Sewage Works Journal*. v.8, n.2, p. 282-316.
- TACKSTON, E. L.; KRENKEL, P. A. (1969a) - Reaeration prediction in natural streams. *American Society Civil Engineers Journal*, v.95, n.SA-1, p. 65-94.
- TASK COMMITTEE ON GAS TRANSFER AT HYDRAULIC STRUCTURES, TECHNICAL COMMITTEE ON HYDRAULIC STRUCTURES and AMERICAN SOCIETY OF CIVIL ENGINEERS (1991) - Gas Transfer at Hydraulic Structures. In: Air-water Mass Transfer-

- 2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, WILHELM, S. C. & GULLIVER, J. S. eds., ASCE. New York, p. 460-493.
- TATERSON, G. B.; YUAN, H. S. (1980) - Steroscopic visualization of flows for pitched blade turbines. *Chemical Engineering Science*. v.35, p. 1369-1375.
- THEOFANOUS, T. G. (1984) - Conceptual models of gas exchange. In: Gas Transfer at Water Surfaces - 1st INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON GAS TRANSFER AT WATER SURFACES, BRUTSAERT, W. & JIRKA, G. H., eds., Ithaca, Dordrecht, D. Reidel Publishing Company, p. 271-281.
- TOOR, H. L.; MARCHELO, J. M. (1958) - Film-penetration model for mass and heat transfer. *Association International Chemical Engineering Journal, AIChE*, v.4, n.1, p. 97-101, mar.
- TRÄGÅRDH, C. (1988) - A hydrodynamics for the simulation of aerated agitated fed-batch fermentor. In: 2nd INTERNATIONAL CONFERENCE ON BIOREACTOR FLUID MECHANICS. Ed. KING, R. Published on behalf of BHRA - The Fluid Engineering Centre. Paper C2. p. 117-134.
- TRUESDALE, G. A.; VAN DYKE, K. G. (1958) - The effect of temperature on the aeration of flowing waters. *Waste and Treatment Journal*, v.7, p. 9-17.
- TSIVOGLOU, E. C.; O'CONNEL, R. L., WALTER, C. M., GODSIL, P. J.; LOGSDON, G. S. (1965) - Tracer measurements of atmospheric reaeration - I. laboratory studies. *Journal of Water Pollution Control Federation*, v.37, n.10, p. 1343-2362.
- TSIVOGLOU, E.C. (1979) - Laboratory studies of gas tracers for reaeration - discussion. *Journal of the Environmental Engineering Division*. v.105, n.EE-2, p. 426-428, april.
- TSIVOGLOU, E.C., COHEN, J.B., SHEARER, S.D., GODSIL P. J. (1968) - Tracer measurement of stream reaeration - II. field studies. *Journal of Water Pollution Control Federation*, v.40, n.2, p. 285-305, february.
- UHL, V. W.; GRAY, J. B. (1966) - Mixing: Theory and Practice. Vol I, 340 p.
- UHL, V. W.; GRAY, J. B. (1967) - Mixing: Theory and Practice. Vol II, 340 p.
- UHL, V. W.; GRAY, J. B. (1986) - Mixing: Theory and practice. v.III, 314p.
- VILLERMAUX, J. (1993) - Basic chemical engineering research. Where are we going? *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.71. Part A, p. 45-52, january.
- VILLERMAUX, J. (1995) - Future challenges in chemical engineering research. *Transactions of Institution of Chemical Engineering*. v.73, Part A, p. 105-109, march.
- WILCOCK, R. J. (1984a) - Methyl chloride as a gas-tracer for measuring stream reaeration coefficient - I. laboratory studies. *Water Resources*. v.18, n.1, p. 47-52.
- WILCOCK, R. J. (1984b) - Methyl chloride as a gas-tracer for measuring stream reaeration coefficient - II. Stream studies. *Water Resources*. v.18, n.1, p 53-57.
- WINARDI, S., NAKAO, S.; NAGASE, Y. (1988) - Pattern recognition in flow visualization around a paddle impeller. *Journal of Chemical Engineering of Japan*. v.21, n.5, p. 503-508.
- WROBEL, L. C. (1989) - Métodos Numéricos e Recursos Hídricos. Rio de Janeiro. ABRH. p. 1- 81.

- XU, G. J.; LI, Y. M.; HOU, Z. Z.; FENG, L. F.; WANG, K. (1997) - Gas-liquid dispersion and mixing characteristics and heat transfer in a stirred vessel. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.75, p. 299-306, april.
- YANG, Z.; SHIH, T. H. (1993) - New time scale based  $\kappa - \varepsilon$  model for near-wall turbulence. *AIAA Journal*, v. 31, p. 1191-1198, july.
- YAWS, C.; WANG, H. C.; PAN, X. (1991) - Henry' Law constants for organic compounds in water. *Chemical Engineering*. New Yourk. p. 179-185, november.
- YOTSUKURA, N.; STEADFAST, D. A.; DRAPER, R. E.; BRUTSAERT, W. H. (1983) - An assesment of steady-sate propane-gas tracer method for aeration coefficients. Cowaselon Creek, New York. *United States Geological Survey Water-resources Investigations*. Report 83-4183, 88p.
- ZEIGLER, B. P. (1976) - *Theory of modelling and simulation*. A Willey-interscience publication. 435 p.
- ZERBINI, E. J. G. J. (1992) - Simulação numérica do escoamento em câmaras ciclônicas com elevada recirculação. São Paulo. 110p. Tese (Doutorado). Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. USP.
- ZHU, J. (1991) - *FAST-2D: A computer program for numerical simulation of two-dimensional incompressible flows with complex boundaries*. Report N° 690. Institute for Hydromechanics. University of Karlsruhe. 52 p, march.
- ZHU, Z. M.; HANNON, J.; GREEN, A. (1992) - Use of high intensity gas liquid mixers na reactors. *Chemical Engineering Science*, v.47, n.9-11, p. 2847-2852.