

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

RITA DE CASSIA FERONI

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA
DE COMPOSTOS ODORANTES ATRAVÉS DA INTERFACE
DE UM SISTEMA MULTIFÁSICO LÍQUIDO-GÁS**

VITÓRIA
2015

RITA DE CASSIA FERONI

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA
DE COMPOSTOS ODORANTES ATRAVÉS DA INTERFACE
DE UM SISTEMA MULTIFÁSICO LÍQUIDO-GÁS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do Grau de Doutor em Engenharia Ambiental, na área de concentração em Poluição do Ar.

Orientador: Prof^o. Neyval Costa Reis Jr.

Orientadora: Prof^a. Jane Meri Santos

VITÓRIA

2015

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)
(Biblioteca Setorial Tecnológica,
Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

F367s Feroni, Rita de Cassia, 1986-
Simulação numérica da transferência de massa de compostos odorantes através da interface de um sistema multifásico líquido-gás / Rita de Cassia Feroni. – 2015.
120 f. : il.

Orientador: Neyval Costa Reis Junior.

Orientador: Jane Meri Santos.

Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Massa –Transferência. 2. Escoamento multifásico.
3. Controle de odor. 4. Turbulência. 5. Lei de Henry. I. Reis Junior, Neyval Costa. II. Santos, Jane Meri. III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. IV. Título.

CDU: 628

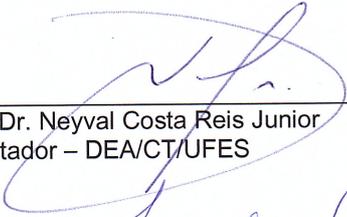


UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

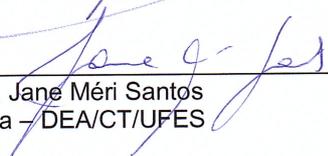
“Simulação numérica da transferência de massa de compostos odorantes através da interface de um sistema multifásico líquido-gás”.

RITA DE CASSIA FERONI

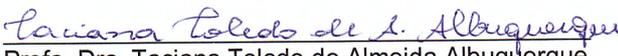
Banca Examinadora:



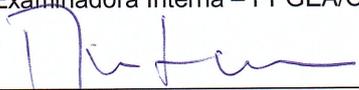
Prof. Dr. Neyval Costa Reis Junior
Orientador – DEA/CT/UFES



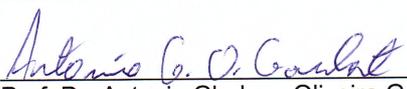
Profa. Dra. Jane Méri Santos
Orientadora – DEA/CT/UFES



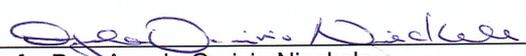
Profa. Dra. Taciana Toledo de Almeida Albuquerque
Examinadora Interna – PPGEA/CT/UFES



Prof. Dr. Davidson Martins Moreira
Examinador Interno - PPGEA/CT/UFES



Prof. Dr. Antonio Gledson Oliveira Goulart
Examinador Externo – FURG



Profa. Dra. Angela Ourivio Nieckele
Examinadora Externa – PUC-RJ

Coordenador do PPGEA: Prof. Dr. Edmilson Costa Teixeira

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Vitória, ES, 04 de dezembro de 2015.

AGRADECIMENTOS

A Deus, ao meu Anjo da Guarda e a Santa Rita de Cassia a quem eu recorri em muitos momentos.

Agradeço a meus pais, Rita e Geraldo pelo amor e dedicação que demonstraram a mim. Vocês sempre me incentivaram nos meus estudos, papai fazia questão de me acordar todos os dias as 5:10h da manhã durante 3 anos para eu ir estudar no CEFET-ES. Mamãe sempre deixou tudo arrumado e pronto para facilitar a minha vida. Quando eu vim para Vitória não foi nada fácil para vocês, mas valeu a pena os longos períodos que passamos distante. Estou realizando um sonho nosso.

Agradeço aos meus irmãos: Gabi, Wilson e Wellington pelo carinho e torcida para que tudo desse certo. Ao Pichuro *in memoriam* pela felicidade que expressava sempre que me via. Aos parentes presentes na minha vida pela alegria demonstrada ao me encontrarem.

Meu caro amigo me perdoe, por favor, se não lhe faço uma visita, mando notícias neste agradecimento..Agradeço aos meus amigos do grupo dos Enroladinhos, em especial a quem mais ouviu o meu chororó, a Mari. Ao Tiago C. agradeço pelo incentivo inicial dado a este trabalho. O Fabio S. foi uma das felicidades que pude conquistar no meu mestrado e doutorado. A todos os amigos e colegas que se preocuparam comigo e me mandaram torpedos, email ou me ligaram perguntando como eu estava nesses anos meio reclusos. Fico feliz por ter conhecido todos vocês.

Aos meus amigos e colegas de laboratório: "o sistema é mau, mas minha turma é legal". Sentirei muita saudade de vocês, das risadas, dos comentários fora de hora, da descontração e também da parte em que resolvíamos falar sério e trocar experiências sobre nossos trabalhos. Não citarei o nome de todos, pois foram muitas pessoas com quem eu convivi nesses anos todos, mas agradeço a todos pelo carinho e bom convívio diário! Aos pesquisadores internacionalmente conhecidos Enilene e Bruno, e também ao Harerton, Fernanda e Willian por participarem em momentos importantes no meu trabalho. A Lucia por sempre me receber com um sorriso. Em especial citarei também o Alexandre que não deixou eu realizar o meu sonho de ser o (a) Melhor Aluno (a) do Laboratório, título que ele detém há mais de 10 anos. A mim sobrou apenas o título de *miss* colírio primavera, até porque, ele não possui os pré-

requisitos para este concurso. Ao Elson agradeço por cuidar de mim deixando claro que eu estava meio gorda e descabelada, do meu carro evidenciando os arranhões que às vezes sei lá como aparecem na lataria, dos meus computadores mostrando para que ele fez engenharia e por demonstrar solidariedade ao me alimentar com pão, coxinha, quibe, chocolate e sorvete quando a minha bolsa acabou. Todos vocês deixaram essa fase da minha vida muito mais legal. Muito *thank you*.

Aos bons professores que passaram pela minha vida acadêmica, só me resta dizer muito obrigada pela ajuda. Aos professores Valmecir Bayer e Elcio Cassimiro, agradeço pela confiança e pelas cartas de recomendação. A minha orientadora professora Jane Santos, agradeço por ter me aceitado como sua aluna no doutorado. Ao meu orientador professor Neyval Reis, agradeço pelas discussões, troca de conhecimento, apoio e pela confiança em acreditar que apesar das dificuldades apresentadas por este trabalho conseguiríamos realizá-lo. Aos professores Taciana Toledo e Davidson Moreira agradeço pela amizade e apoio. Aos professores Antônio Goulart e Ângela Nieckele agradeço por aceitarem participar e contribuir com a minha banca de tese. A UFES e ao PPGEA pela estrutura fornecida.

Alguns agradecimentos adicionais, mas muito pertinentes devem ser feitos. Agradeço ao criador e disponibilizador do *Team viwer*. Aos criadores e participantes dos fóruns de discussões em CFD. Ao criador do remédio que cura todas as tristezas e angústias dourísticas: Chocolate. Ao pó de café da "fazenda" de Marilândia que a mamãe me manda mensalmente para eu me manter acordada para trabalhar.

Por fim, devo agradecer a mim mesma pela minha grande teimosia em conseguir terminar esse doutorado. Não fui *gauche* na vida e não levei o sorriso de ninguém como a Rita do Chico, fui apenas "uma realista esperançoso".

A CAPES e a FAPES pelo apoio financeiro.

E essa mulher tinha três filhos, eles aparentavam 17, 16 e 15 anos. Aí ela disse: "Vocês tiveram muitos problemas com os filhos?" "Não..problemas normais..." "A gente também não! O problema da gente só é que os professores dos nossos filhos não tem nível suficiente pra conversar com nossos filhos." Eu pensei "Danou-se! é mãe de Ruy Barbosa, Joaquim Nabuco e Castro Alves!" Veja a minha ingenuidade, não era nível intelectual não, que isso não interessava, era nível econômico! E ela disse: "Outro dia o nosso caçula chegou aqui arrasado, porque foi conversar com o professor dele sobre o nosso vídeo importado da marca 'X', e o professor nunca sequer nem tinha visto o vídeo da marca 'X'!" Aí virou-se pra mim e disse: "Agora me diga Ariano, que respeito um estudante pode ter por um professor que nunca nem sequer viu um vídeo da marca 'X'?" Aí eu me acovardei, eu já não tinha ido à Disney, e eu disse: "É mesmo!" Me acovardei, confesso! morrendo de medo que ela me perguntasse qual era a diferença de um vídeo da marca 'X' para os vídeos comuns!

Ariano Suassuna, Aula Espetáculo (transcrição).

RESUMO

A emissão de gases odorantes a partir de uma superfície líquida pode ser representada em um escoamento multifásico, em que a turbulência é gerada na proximidade da interface líquido-gás. Esta interface pode ser deformável, com ou sem a presença de ondas. A principal resistência ao transporte de massa através da interface líquido-gás está limitada a uma subcamada muito fina de cada lado da interface, em dimensões de poucos milímetros, onde a turbulência é reduzida e os processos de difusão tornam-se dominantes. Assim, a relação entre a turbulência do escoamento e a configuração da interface (relação com o número de Reynolds) em conjunto com as propriedades do composto como, difusividade (relação com o número de Schmidt) e solubilidade (relação com constante de Henry), são fundamentais para o estudo de transferência de massa na interface líquido-gás. A fim de investigar a relação existente entre os parâmetros citados, um estudo multifásico de transferência de massa foi realizado neste trabalho, utilizando o código computacional ANSYS-CFX 14.5, com a aplicação do modelo de turbulência de simulação das grandes escalas (LES). O modelo matemático foi validado com dados de simulação numérica direta (DNS) a partir do estudo de Komori et al. (2010). Os resultados mostram que a transferência de massa é fortemente afetada pela presença de ondas na interface que contribuem para a formação de estruturas turbulentas na fase líquida. Assim, valores de coeficientes de transferência de massa (k_l) para diferentes números de Reynolds estudados (210, 86 e 43) mostraram grande diferença em ordem de grandeza. Da mesma forma, ao considerar compostos odorantes com diferentes valores da constante de Henry, foi possível mostrar no presente estudo, que a transferência de massa também possui forte dependência em relação a este parâmetro. Valores maiores de k_l são encontrados para compostos odorantes como o sulfeto de hidrogênio cuja transferência de massa é controlada pela fase líquida, seguido da amônia cuja transferência de massa é controlada por ambas as fases e do ácido valérico com a transferência de massa controlada pela fase gasosa.

Palavras-chave: Transferência de Massa, Escoamento Multifásico, Compostos Odorantes, Turbulência, Constante de Henry.

ABSTRACT

The emission odorous compounds from liquid-gas interface can be represented from multiphase flow and the generation of turbulence occurs close to the liquid-gas interface. Other characteristics are the likely configurations of the deformable interface with the presence or not of waves. The major part of the resistance to mass transport through liquid-gas interface is limited to a thin sub-layer from both sides of interface, in a few millimeters of dimension, where the turbulence is small and the diffusion processes become dominant, the relation between turbulence flow and the interface configuration (related to Reynolds number) together with the properties of the compound, as the diffusivity (related to Schmidt number) and solubility (related to Henry's constant), are primordial to the study of mass transfer. In this work, in order to investigate the relation between the parameters quoted above, a multiphase mass transfer assay was made using the computational model ANSYS-CFX 14.5, applying the turbulence model for large eddy simulation (LES). The mathematic model was validated with data of direct numeric simulations (DNS) from the work of Komori et al. (2010). The results show that the mass transfer is strongly affected by the presence of waves on interface, leading to the formation of turbulent structures in the liquid side. Thereby, values of mass transfer coefficients (k_l) for different Reynolds numbers (210, 86 and 43) show large differences in order of magnitude. Likewise, considering odorous compounds with different values for Henry's constants, this work show that the mass transfer also has a strongly dependence with this parameter. Higher values of k_l are found for odorous compounds such as hydrogen sulfide in which the mass transfer is controlled by liquid phase, followed by ammonia in which the mass transfer is controlled by both liquid and gas phases and the isovaleric acid with mass transfer controlled by the gas phase.

Keywords: Mass transfer, Multiphase Flow, Odorant compounds, Turbulence, Henry's law

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Imagem instantânea da interface líquido-gás submetida a crescentes velocidades de fricção obtidas em experimento utilizando velocimetria por imagem de partículas. As cristas das ondas são tracejadas com linhas brancas.	26
Figura 2.2 - Esquema mostrando os processos identificados na presença de ondas: (a) onda menos íngreme e sem quebra. (b) quebra de onda em microescala. (c) configuração para um caso real da interface sem quebra de onda (d) configuração para um caso real da interface com quebra de onda em microescala.	28
Figura 2.3 - Formação de estruturas coerentes próximas a região de placa plana.	29
Figura 2.4 - Movimento de um componente A através da interface entre duas fases.	34
Figura 2.5 - Relação entre a constante de Henry e o processo de transporte nas fases líquida e gasosa em relação ao processo global de transferência.	38
Figura 2.6 - Constante de Henry para diversas substâncias, considerando uma interface água-ar. As faixas A, B e C indicam, respectivamente, as substâncias que apresentam resistência predominante no ar, em ambas as fases e na água.	39
Figura 3.1 - Representação esquemática 3D do problema proposto.	44
Figura 3.2 - Correlação de dois pontos nas direções longitudinal R_{uu} e transversal R_{ww} ao escoamento.	62
Figura 3.3 - Domínio e malha computacional utilizados no presente estudo.	63
Figura 3.4 - Configuração do perfil vertical de velocidade próximo a parede.	66
Figura 3.5- Superfície de um volume de controle.	68
Figura 4.1 - Configuração instantânea da interface líquido-gás para o tempo adimensional de 130 para: (a) Komori et al. (2010) e (b) presente estudo.	71
Figura 4.2 - Evolução temporal da variação vertical da altura da interface líquido-gás para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.	71
Figura 4.3 - Evolução temporal do perfil de velocidade média na interface líquido-gás para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.	72
Figura 4.4 - Perfil vertical de velocidade média na direção longitudinal na fase gasosa para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.	73
Figura 4.5 - Comparação da distribuição da intensidade da turbulência vertical das flutuações de velocidade na fase gasosa para as componentes: (a) u'_{rms} , (b) v'_{rms} e (c) w'_{rms} entre o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.	74

Figura 4.6 - Perfil vertical de velocidade média na direção longitudinal na fase líquida para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.....	74
Figura 4.7 - Comparação da distribuição da intensidade da turbulência vertical das flutuações de velocidade na fase líquida para as componentes: (a) $u'_{rms}{}^+$, (b) $v'_{rms}{}^+$ e (c) $w'_{rms}{}^+$ entre o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.....	75
Figura 4.8 - Comparação da evolução temporal do coeficiente de transferência de massa do composto na fase líquida entre o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.....	77
Figura 4.9 - Comparação da distribuição da concentração do escalar em t_s^+ iguais a 13 e 53 para: (a) o estudo de Komori et al. (2010) e (b) para o presente estudo.....	78
Figura 4.10 - Configuração instantânea da interface líquido-gás no tempo adimensional de 160 para: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3.....	80
Figura 4.11 - Evolução temporal da variação vertical da altura da interface líquido-gás para os três casos de estudo.	81
Figura 4.12 - Evolução temporal da velocidade média na interface líquido-gás para os três casos de estudo.	83
Figura 4.13 - Configuração da velocidade instantânea na direção x para $t^+ = 160$	83
Figura 4.14- Perfil vertical de velocidade do vento na fase gasosa para os três casos de estudo.	84
Figura 4.15 - Distribuição vertical da intensidade da turbulência na fase gasosa para os três casos estudados, para as componentes: (a) $u'_{rms}{}^+$, (b) $v'_{rms}{}^+$ e (c) $w'_{rms}{}^+$	85
Figura 4.16 - Isosuperfície instantânea do critério Q na fase gasosa próxima a interface no tempo adimensional de 160.	88
Figura 4.17 - Perfil vertical de velocidade na fase líquida para os três casos de estudo.	89
Figura 4.18- Distribuição vertical da intensidade da turbulência na fase líquida para os três casos estudados, para as componentes: (a) $u'_{rms}{}^+$, (b) $v'_{rms}{}^+$ e (c) $w'_{rms}{}^+$	90
Figura 4.19 - Isosuperfície instantânea do critério Q na fase líquida próxima a interface no tempo adimensional de 160.	92
Figura 4.20 - Representação da isosuperfície de velocidade vertical na água para o tempo adimensional de 60.	92
Figura 4.21 - Acompanhamento temporal das estruturas do tipo cogumelo em um plano transversal a direção principal do escoamento (letra.2) a partir da configuração instantânea da	

interface (letra.1) nos tempos adimensionais de: (a) $t^+ = 59,88$, (b) $t^+ = 59,95$, (c) $t^+ = 60,02$, (d) $t^+ = 60,08$, (e) $t^+ = 60,15$ até (f) $t^+ = 60,22$	94
Figura 4.22 - Acompanhamento temporal dos vórtices do tipo grampo de cabelo em um plano transversal (letra.1) e longitudinal ao escoamento (letra.2) a partir da configuração instantânea da interface nos tempos adimensionais de: (a) $t^+ = 59.88$, (b) $t^+ = 59.95$, (c) $t^+ = 60.02$, (d) $t^+ = 60.08$, (e) $t^+ = 60.15$ até (f) $t^+ = 60.22$	96
Figura 4.23 - Acompanhamento temporal dos vórtices transversais nos tempos adimensionais de: (a) $t^+ = 80$, (b) $t^+ = 100$, (c) $t^+ = 120$, (d) $t^+ = 130$, (e) $t^+ = 160$	97
Figura 4.24 - Coeficiente de transferência de massa para os três casos de estudo.....	99
Figura 4.25 - Comparação da mensuração de k_l a partir da Equação (4.5) e da simulação do presente estudo.	100
Figura 4.26 - Distribuição instantânea da concentração do escalar nos tempos adimensionais de (a) 13 e (b) 113 para os três casos de estudo.	103
Figura 4.27 - <i>Zoom</i> da interface líquido-gás para identificar uma estrutura na forma de cogumelo em um plano transversal ao escoamento transportando concentração, para os Casos 1 e 2.	104
Figura 4.28 - Distribuição do fluxo de massa turbulento da fase líquida para a fase gasosa na interface líquido-gás para t_s^+ igual a 113.....	105
Figura 4.29 - Perfil de concentração para os três números de Henry estudados, sendo (a) $K_H = 8 \times 10^{-1}$, com a fase líquida controladora do processo, (b) $K_H = 5 \times 10^{-4}$, ambas as fases importantes para a transferência de massa e (c) $K_H = 2 \times 10^{-5}$, fase gasosa mais importante que a fase líquida na transferência de massa do composto. As concentrações do composto na fase líquida e na fase gasosa são representadas, por C_l e C_g , respectivamente.	107

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Configurações das simulações de interesse.....	59
Tabela 3.2 - Coordenadas dos pontos utilizados para correlação de dois pontos.....	62
Tabela 4.1 - Comparação entre o valor máximo do RMS da flutuação de velocidade adimensionalizada, para a fase gasosa para as três componentes de velocidade.....	73
Tabela 4.2 - Comparação entre o valor máximo do RMS da flutuação de velocidade adimensionalizada, para a fase líquida para as três componentes de velocidade.....	76
Tabela 4.3 - Valores da constante de Henry correlacionados ao coeficiente de transferência de massa.	108

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Romanos

A_i	área da interface
B	constante no perfil de velocidade turbulenta
C_A	concentração mássica da espécie química A
C_s	constante de Smagorinsky
d	espessura da camada de concentração para a fase
d_1	comprimento do domínio
D_A	coeficiente de difusão molecular da espécie química A
$f_{\alpha\beta}$	força superficial contínua
$F_{\alpha\beta}$	força devido a tensão superficial
F_{ij}	fluxo da propriedade conservável
g_i	componente da aceleração da gravidade na direção i
$G(\vec{x})$	função filtro por volume
H_s	variação vertical da altura da interface
h	altura do domínio computacional
$J_{\alpha\beta}^A$	fluxo de transferência de massa do composto A na interface
J_A	fluxo mássico do componente A do seio da fase até a interface
K_H	constante de Henry
K_{Hcrit}	constante de Henry crítica
K^c	constante de proporcionalidade
k	coeficiente de transferência de massa local da fase
K	coeficiente de transferência de massa global da fase
L	comprimento característico relacionada ao número de Reynolds turbulento
L_{ij}	tensor de Leonard
L_{cj}, M_{cj}	fluxos turbulentos adicionais
M_{ij}	tensão de Reynolds de escala submalha
M_A	concentração molar da espécie química A

M	concentração molar total da fase
MM_A	massa molecular do composto A
N_P	número total de fases
\vec{n}	vetor normal à interface
n_A	fluxo molar do componente A do seio da fase até a interface
P	pressão
q_{ij}^s	fluxo de massa submalha
Re	número de Reynolds
Re_*	número de Reynolds baseado na velocidade de fricção
Re_t	número de Reynolds relacionado a turbulência
$R_{11}(y, r_1)$	correlação de dois pontos
r	fração volumétrica
S_{ij}	tensor taxa de deformação
Sc	número de Schmidt
u_i	componente da velocidade na direção i
u', v', w'	flutuação da velocidade nas direções x , y e z , respectivamente
$u'_{rms}, v'_{rms}, w'_{rms}$	RMS da flutuação da velocidade nas direções x , y e z , respectivamente
$U_{interface}$	velocidade na interface
u''	macro escala de velocidade
t	tempo relacionado ao escoamento
t_s	tempo relacionado a concentração
T_{ij}	Tensor de tensão submalha
X_A	fração molar do composto A
x_i	coordenadas cartesianas
x, y, z	eixos coordenados
y_A	fração mássica do componente A

Letras Gregas

α e β	fases
Γ_ϕ	difusividade
$\delta_{\alpha\beta}$	função delta de interface
Δ	tamanho característico do filtro
ε	taxa de dissipação de energia turbulenta
κ	energia cinética turbulenta
$\kappa_{\alpha\beta}$	curvatura da superfície
μ	viscosidade dinâmica do fluido
ν	viscosidade cinemática do fluido
ν_{turb}	viscosidade turbulenta
ρ	massa específica
$\sigma_{\alpha\beta}$	tensão superficial do fluido
τ_{ij}	tensor das tensões
τ_{ij}^s	tensor de Reynolds de escala sub-malha
ϕ	variável genérica
P	taxa de produção de energia turbulenta
ω_x	vorticidade na direção x

Subscritos

*	relacionado a velocidade de fricção
α e β	fases genéricas
0	relacionada ao tempo inicial
A	substância química
b	variável localizada no seio da fase
i	variável localizada na interface
g	fase gasosa
l	fase líquida
mix	mistura das fases

Sobrescrito

+	variável adimensionalizada
–	componente média da variável
'	componente filtrada da variável
~	filtro sub-teste

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	18
2	REVISÃO DA LITERATURA.....	22
2.1	ESCOAMENTO MULTIFÁSICO.....	22
2.2	MODELAGEM DA TURBULÊNCIA EM ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS	23
2.2.1	Análise do escoamento e da turbulência próxima à interface líquido-gás	25
2.3	TRANSFERÊNCIA DE MASSA ATRAVÉS DA INTERFACE LÍQUIDO-GÁS	31
2.3.1	Análise da transferência de massa na interface líquido-gás em escoamento multifásico turbulento.....	33
3	METODOLOGIA.....	44
3.1	MODELAGEM MATEMÁTICA.....	44
3.1.1	Modelo Homogêneo e equações governantes	45
3.1.2	Modelos de escoamento multifásico.....	50
3.1.3	Metodologia de simulação de grandes escalas - LES.....	52
3.2	DESCRIÇÃO DAS CONFIGURAÇÕES UTILIZADAS NAS SIMULAÇÕES DE INTERESSE.....	58
3.2.1	Configurações dos casos selecionados para validação e avaliação dos parâmetros de interesse.....	58
3.2.2	Domínio computacional	59
3.2.3	Malha computacional	63
3.2.4	Adimensionalização das variáveis de interesse	64
3.2.5	Condições de contorno e condições iniciais	65
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	70
4.1	VALIDAÇÃO DO MODELO PROPOSTO.....	70
4.2	COMPORTEAMENTO DA INTERFACE PARA OS TRÊS NÚMEROS DE REYNOLDS ESTUDADOS	79
4.3	ANÁLISE DO ESCOAMENTO TURBULENTO NA FASE GASOSA.....	82
4.4	ANÁLISE DO ESCOAMENTO TURBULENTO NA FASE LÍQUIDA	87
4.5	ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA PARA TRÊS NÚMEROS DE REYNOLDS ESTUDADOS	97
4.6	INFLUÊNCIA DA CONSTANTE DE HENRY NA TRANSFERÊNCIA DE MASSA	105
5	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	109
5.1	RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	110
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	112

1 INTRODUÇÃO

O estudo da transferência de massa de gases através da interface líquido-gás é importante para uma variedade de aplicações, desde a absorção de CO₂ pelos oceanos (TURNEY et al., 2005; MAGNAUDET e CALMET, 2006; HASEGAWA e KASAGI, 2009, KOMORI et al. 2010) até a quantificação da emissão de compostos odorantes em estações de tratamento de esgotos (HUDSON e AYOKO, 2008; BLUNDEN et al., 2008; FERONI et al., 2012, SANTOS et al., 2012). A transferência de massa de compostos odorantes a partir da interface líquido-gás torna-se uma poderosa contribuição de poluição odorante para a atmosfera, sendo as estações de tratamento de esgoto (ETE) uma das principais fontes geradoras de odor em ambientes urbanos. Nestes empreendimentos são encontradas lagoas com superfícies líquidas (quiescentes ou agitadas) expostas ao escoamento atmosférico onde ocorre a emissão de um gás da fase líquida para a atmosfera.

Vários autores têm investigado a transferência de massa de compostos da fase líquida para a fase gasosa, para a determinação experimental do coeficiente de transferência de massa da fase líquida (COHEN et al., 1978, MACKAY e YEUN, 1983, TRAPP e HARLAND, 1995, CHAO et al., 2005, CHAO, 2009, AROGO et al., 1999b, BLUNDEN et al., 2008 e SANTOS et al., 2012). Entretanto a fina espessura da camada de concentração é de difícil medição experimental e assim, dificulta a estimativa do coeficiente de transferência de massa.

Em decorrência desta dificuldade, vários autores quantificaram o coeficiente de transferência de massa entre as fases líquida e gasosa, a partir da aplicação de modelos matemáticos, que envolvem a solução numérica das equações de transporte. A principal limitação, para a realização de simulação numérica, está relacionada ao esforço computacional para modelar o efeito da turbulência, a partir de número de Reynolds baseado na velocidade de fricção, Re_* , maiores que 150 e 200, para estudos utilizando simulação numérica direta (DNS) ou simulação das grandes escalas (LES).

Estudos encontrados na literatura científica sobre a transferência de massa na interface líquido-gás utilizando simulação numérica, variam desde aqueles que consideram um tanque com uma fase líquida em regime laminar, onde a superfície líquida é quiescente, caracterizada pelo baixo grau de agitação da interface (CUESTA et al., 1999, LIMPT et al., 2005 e

FERONI et al., 2012), até outros que consideram a simulação apenas da fase líquida em regime turbulento (NAGAOSA, 1999, DONG et al., 2003, MAGNAUDET e CALMET, 2006) assumindo que os mecanismos de transporte na fase gasosa não são limitantes do processo. Os estudos multifásicos vêm ganhando espaço para analisar as interações que acontecem na interface líquido-gás e obter resultados mais conclusivos sobre o escoamento e a transferência de massa.

Estudos multifásicos consideram uma fase líquida e uma fase gasosa com uma interface de transferência entre elas e apresentam um desafio para a modelagem numérica: correlacionar a transferência de massa de um composto com a formação de pequenas ondas na interface líquido-gás geradas a partir do escoamento da fase gasosa, juntamente com as estruturas turbulentas que surgem próximas a esta região. Um dos principais obstáculos para as simulações numéricas é o fato de que a maior parte da resistência ao transporte de massa através da interface líquido-gás está limitada a uma subcamada muito fina de cada lado da interface, em dimensões de poucos milímetros onde a turbulência é reduzida e os processos de difusão tornam-se dominantes. Esta espessura varia de acordo com o composto analisado (relação com o número de Schmidt) e a intensidade da turbulência do escoamento (relação com o número de Reynolds).

Muitos estudos, que envolvem apenas a transferência de quantidade de movimento ou que contemplam também a transferência de massa, vêm sendo realizados para compreender os fenômenos que ocorrem na região muito próxima à interface. Alguns desses estudos consideram uma condição artificial para interface líquido-gás como indeformável (RASHIDI e BANERJEE, 1988, LOMBARDI et al., 1996, RASHIDI, 1997, FULGOSI et al., 2003, HASEGAWA e KASAGI, 2009 e LIU et al., 2009). Outros estudos simulam superfícies deformáveis, casos que podem envolver a formação de ondas na interface (DE ANGELIS et al., 1997, LIN et al., 2008, HASEGAWA e KASAGI, 2009, KOMORI et al., 2010, TURNEY e BANERJEE, 2013 e TAKAGAKI et al., 2015).

A deformação da interface é dependente da velocidade do escoamento da fase gasosa sobre a superfície líquida que pode ser plana, com pequenas perturbações (ondas capilares ou *ripples*) ou grandes perturbações (ondas). De acordo com Turney et al. (2005), a velocidade de fricção na interface na fase gasosa deve ser inferior a 0,1 m/s para que não ocorra a formação de ondas na interface líquido-gás.

Além da influência do escoamento, a transferência de massa é influenciada pelo número de Schmidt (Sc) e pela constante de Henry (K_H). O número de Schmidt representa a relação entre os fenômenos de transferência de quantidade de movimento e transferência de massa por difusão molecular, indicando a relação entre as forças viscosas e o fenômeno da difusão. Considerando que para a simulação numérica de transferência de massa devem existir ao menos três pontos dentro da camada difusiva de concentração (Calmet e Magneudt, 2006), que é estimada a partir do inverso da raiz quadrada do número de Schmidt, valores altos dessa variável aumentam o custo computacional da simulação (DONG et al., 2003, MAGNAUDET e CALMET, 2006, HASEGAWA e KASAGI, 2009, LIU et al. 2009, KOMORI et al., 2010 e TAKAGAKI et al., 2015). Por outro lado, a constante de Henry, indica se o processo de transferência de massa é controlado pela fase líquida, pela fase gasosa ou ambas as fases, dependendo das propriedades químicas das substâncias envolvidas (solvente e soluto) (HUDSON e AYOKO, 2008 e LIU et al., 2009). Este é um fator determinante para a utilização de estudos multifásicos que podem analisar a transferência de massa de compostos em um grande intervalo da constante de Henry.

Nesse contexto, o presente trabalho tem como objetivo: estudar a influência do escoamento turbulento próximo a interface líquido-gás, e das configurações da interface, na transferência de massa da fase líquida para a fase gasosa de compostos com diferentes propriedades químicas. Dessa forma, os objetivos específicos deste trabalho são: (i) verificar como a interface líquido-gás se deforma para diferentes valores de velocidade de fricção da fase gasosa e como surgem as estruturas turbulentas próximas a interface; (ii) analisar como as estruturas turbulentas formadas próximas à interface influenciam na transferência de massa de um composto da fase líquida para fase gasosa; (iii) verificar a influência da constante de Henry, em um intervalo que possua valores onde a fase líquida, a fase gasosa e ambas as fases, sejam importantes para o processo de transferência de massa e que inclua compostos que sejam identificados como odorantes.

A fim de atender os objetivos anteriormente citados, o presente trabalho está dividido em seis capítulos. O Capítulo 2 apresenta uma revisão da literatura correspondente a teoria e estudos com características similares ao presente trabalho. O Capítulo 3 traz a metodologia utilizada no presente estudo com a descrição dos parâmetros importantes para as simulações. No Capítulo 4, são apresentados os resultados deste trabalho. O Capítulo 5 destina-se as

conclusões e recomendações para trabalhos futuros. O Capítulo 6 destina-se as referências bibliográficas utilizadas neste estudo.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo traz uma contextualização sobre a modelagem de escoamentos multifásicos em tanques, com as possíveis configurações da interface líquido-gás, turbulência próxima a interface e o processo de transferência de massa de um composto.

2.1 ESCOAMENTO MULTIFÁSICO

No contexto da mecânica dos fluidos, os escoamentos multifásicos são considerados como qualquer sistema constituído de duas ou mais fases distintas, que fluem simultaneamente em mistura, tendo um grau de separação de fase a uma escala bem acima do nível molecular (BRENNEN, 2005 e YEOH e TU, 2009). A complexidade que acompanha o escoamento multifásico se origina da existência de múltiplas, deformáveis e móveis interfaces concomitantes, com significativa descontinuidade de propriedades do fluido e campo de escoamento perto da interface (ISHII e HIBIKI, 2011).

Escoamentos multifásicos podem, em geral, existirem de diferentes formas e serem classificados dependendo das combinações de fases. Os escoamentos de duas fases podem ser classificados de acordo com o estado das diferentes fases, como exemplo: escoamentos gás-sólido, escoamentos sólido-líquido, escoamentos líquido-gás, ou ainda os escoamentos de três fases como o gás-líquido-sólido que são escoamentos trifásicos (YEOH e TU, 2009 e ISHII e HIBIKI, 2011). Um quarto tipo de escoamento bifásico também encontrado é o escoamento líquido-líquido, quando duas substâncias encontram-se no estado líquido e são imiscíveis (ISHII e HIBIKI, 2011). O quarto grupo não é um escoamento de duas fases, no entanto, para todos fins práticos, pode ser tratado como se fosse uma mistura de duas fases (ISHII e HIBIKI, 2011).

Uma segunda classificação ocorre de acordo com a estrutura da interface podendo denotar os escoamentos como: escoamento separado, escoamento de transição ou misturado (intermitente) e escoamento disperso. O escoamento de regime disperso consiste em partículas discretas, sólidas, gotas ou bolhas não conectadas distribuídas em um volume preenchido por uma fase contínua (BRENNER, 2009). No regime de fases separadas, ambas as fases são contínuas, separadas por uma interface, podendo ou não existir algumas bolhas de

uma fase na outra. O regime intermitente caracteriza-se pela presença de uma fase separada e uma dispersa em um mesmo escoamento (ISHII e HIBIKI, 2011). Estas sub-classificações podem ser vistas com mais detalhes em Yeoh e Tu (2009) e Ishii e Hibiki (2011).

Segundo Rosa (2012), os padrões ou regimes de escoamento multifásicos, tem por função associar a uma palavra todas as características geométricas de um arranjo específico das interfaces e não existe um completo consenso na utilização dos nomes para identificar os padrões. A classificação e nomenclatura pode variar de autor para autor.

Um tipo de escoamento líquido-gás separado é o escoamento estratificado onde o líquido se encontra na parte inferior do tubo em condições normais de gravidade. Nestes escoamentos ocorre a presença de uma superfície livre e estão inseridos na categoria de fluidos imiscíveis. A imiscibilidade de dois fluidos que gera uma superfície livre é um resultado da forte força de coesão que existe entre as suas moléculas (YEHO e TU, 2009). A facilidade com que esses fluidos podem ser misturados é geralmente expressada por um coeficiente determinado experimentalmente denominado tensão superficial (YEHO e TU, 2009). Quanto maior o valor deste coeficiente, mais forte será a resistência para que os fluidos sejam misturados. Para fins práticos, eles podem ser tratados na forma de misturas de duas fases (YEHO e TU, 2009) como um caso especial de escoamento de duas fases. Neste caso, as regiões de líquido e de gás podem ser tratadas separadamente e, em seguida, ligadas através de condições cinemática e dinâmica apropriada na interface (YEHO e TU, 2009). Superfícies livres requerem o uso de modelos especiais para definir a sua localização, o movimento e a influência em um escoamento (YEHO e TU, 2009). Neste caso, um método de localização de interface precisa ser implementado. Detalhes sobre os métodos de localização de interface podem ser vistos no estudo de Lakehal et al. (2002), onde é feita uma revisão bibliográfica sobre os métodos freqüentemente empregados em estudos de escoamentos multifásicos.

2.2 MODELAGEM DA TURBULÊNCIA EM ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

Antes de modelar um problema é necessário realizar uma análise do escoamento. Na maioria das situações de interesse prático prevalece no escoamento um comportamento caótico de grande complexidade, a turbulência.

Reynolds demonstrou que escoamentos de fluidos mudam de um estado ordenado e predizível para um estado caótico e não predizível, quando um determinado parâmetro adimensional excede o seu valor crítico e estabeleceu claramente a existência de dois regimes fundamentais de escoamento: o laminar e o turbulento. O parâmetro adimensional, que controla a transição de um regime para o outro, tornou-se posteriormente conhecido como número de Reynolds e é definido como:

$$\text{Re} = \frac{u L}{\nu} \quad (2.1)$$

onde u é uma velocidade característica, L é um comprimento característico e ν é a viscosidade cinemática do fluido. Os escoamentos turbulentos sempre ocorrem para altos números de Reynolds.

Os estudos de escoamentos turbulentos multifásicos podem ser feitos tanto experimentalmente como por meio de modelagem computacional. Alguns trabalhos experimentais utilizam equipamentos e técnicas como a velocimetria por imagem de partícula (PIV- *particle image velocimetry*) (TURNERY et al., 2005 e PEIRSON et al., 2014), e a fluorescência induzida por laser (LIF- *laser-induced fluorescence*) (JIRKA et al., 2010), permitindo a visualização bi e tridimensional das estruturas do escoamento.

Trabalhos que empregam simulação numérica utilizam técnicas de modelagem da turbulência usualmente divididas em três grupos:

- Modelos baseados nas Equações Médias de Reynolds (RANS): as escalas de turbulência são modeladas baseando-se nas equações médias de Reynolds;
- Simulação de Grandes Escalas (LES): simula diretamente as grandes escalas e modela as pequenas escalas do escoamento turbulento.
- Simulação Numérica Direta (DNS): resolve diretamente a partir das equações de conservação todas as escalas da turbulência;

Simulações utilizando DNS têm sido realizadas em estudos multifásicos por diversos pesquisadores, entre eles, Lombardi et al. (1996), Nagaosa (1999), Fulgosi et al. (2003), Banerjee (2006), Lin et al. (2008), Desoutter et al. (2009), Liu et al. (2009), Hassanvand e Hashemabadi (2011), Komori et al. (2012) e Takagaki et al. (2015). O uso de LES pode ser

visto no estudo multifásico de Reboux et al. (2006) com um modelo de Smagorinsky para o fechamento da turbulência. Alguns autores utilizaram modelos híbridos como o estudo de Hasegawa e Kasagi (2007) e Hasegawa e Kasagi (2009), empregando uma técnica híbrida de DNS e LES para resolver o problema, onde a modelagem LES é empregada para resolver a fase líquida do escoamento enquanto a modelagem DNS é empregada para resolver a fase gasosa. A principal limitação destes estudos está relacionada ao esforço computacional necessário para utilização de DNS e LES, que limita o valor de Re das simulações efetuadas. Assim, os maiores valores de número de Reynolds, Re_* , calculado usando a velocidade de fricção e a metade da altura do tanque, geralmente estão entre 150 e 200.

2.2.1 Análise do escoamento e da turbulência próxima à interface líquido-gás

Antes de iniciar uma discussão sobre a turbulência próxima à interface líquido-gás, um ponto de partida para uma análise mais detalhada requer considerar onde a turbulência é produzida, sendo que dois principais casos podem ocorrer (GUALTIERI e DORIA, 2008). A interface pode ter uma condição com deslizamento livre, o que ocorre em escoamentos em canais onde a turbulência é produzida longe da interface, no fundo do canal, com condição de não deslizamento e trazida até a interface. Outra configuração seria considerar um escoamento multifásico, encontrados em estudos que simulam tanques, lagos ou mar, onde o vento escoam sobre a interface líquido-gás. Quando ventos significativos escoam sobre a superfície livre podem gerar ondas devido ao cisalhamento do vento sobre a interface líquido-gás (GUALTIERI e DORIA, 2008).

Estudos como o de Lombardi et al. (1996), Banerjee et al. (2004), Lin et al. (2008) e Komori et al. (2010) verificaram que para o caso em que os fluidos são o ar e a água, as características da turbulência no lado do gás são bastante semelhantes às de regiões de parede com as flutuações de velocidade na parede sendo levadas a zero. O mesmo não é observado para a interface do lado do líquido que mostra flutuações maiores de velocidade perto da interface. Assim, os movimentos turbulentos do lado do líquido ocorrem por indução dos movimentos da fase gasosa (KOMORI et al., 2010).

Mais tarde, Turney et al. (2005) investigando as estruturas de turbulência do lado líquido na interface líquido-gás e seus efeitos sobre a transferência de calor e massa, verificaram que a

velocidade de fricção na interface na fase gasosa deve ser inferior a 0,1 m/s para que não ocorra a formação de ondas na superfície do líquido. Esta velocidade de fricção corresponde a velocidade do vento a 10 m de cerca de 3,5 m/s. As perturbações que podem ocorrer na superfície líquida, devido ao forte cisalhamento decorrente do escoamento do gás sobre a interface, são de dois tipos, (i) as pequenas perturbações, ondas capilares (*ripples*), cujas características principais são a baixa amplitude, o baixo comprimento e a alta frequência e (ii) as grandes perturbações, ondas (*disturbance waves*), que caracterizam-se pela alta amplitude, grande comprimento e frequência menor que a das pequenas perturbações. Essa transição entre uma superfície plana, com pequenas ondulações e ondulada pode ser vista na Figura 2.1 abaixo retirado do trabalho de Turney et al. (2005). A presença de ondas na interface favorece a presença da turbulência e de estruturas característica desse tipo de escoamento.

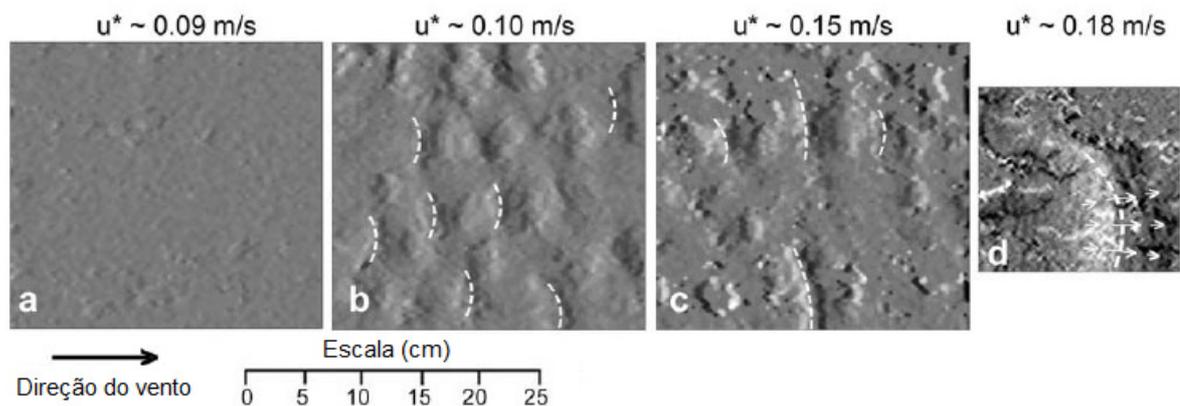


Figura 2.1 - Imagem instantânea da interface líquido-gás submetida a crescentes velocidades de fricção obtidas em experimento utilizando velocimetria por imagem de partículas. As cristas das ondas são tracejadas com linhas brancas.

Fonte: Adaptado de TURNEY et al., 2005.

Peirson et al. (2014) realizou em seu estudo uma revisão da literatura para identificar os movimentos próximos à interface que poderão ocorrer com a deformação da interface líquido-gás. A Figura 2.2 (a) mostra alguns processos que podem surgir nas proximidades da interface líquido-gás. Um deles é o divergente de superfície, dado devido as flutuações de velocidade, onde existe parcela de fluido ascendente em direção a interface e divergente em direção ao seio da fase. O divergente de superfície pode ser escrito como: $\gamma = (\partial u' / \partial x + \partial w' / \partial z) = -\partial v' / \partial y$, onde u' , v' e w' , são as flutuações das componentes da velocidade nas direções x , y e z . Regiões de renovação de superfície também são sugeridas nas

proximidades da interface onde o fluido é substituído por porções de fluido vindas do interior do tanque devido a ação de vórtices turbulentos. O estudo cita também as ondas capilares características na superfície e localizadas a jusante da crista da onda. Estas ondas possuem característica de alta vorticidade e podem desempenhar papel importante na troca de fluido na interface.

Um outro efeito que pode ser visto na região próxima da interface está na Figura 2.2 (b) onde a crista da onda se projeta para frente e se enrola sobre a face frontal, em direção oposta ao escoamento, arrastando com ela a região da superfície e criando uma região de grande turbulência. Neste caso, ocorre a quebra da onda em microescala.

A Figura 2.2 (c) e Figura 2.2 (d), retiradas do estudo de Peirson et al. (2014), mostram fotografias desses dois tipos de ondas. A primeira está relacionada ao esquema da Figura 2.2 (a) e para este caso, a velocidade de fricção da fase gasosa é igual a 0,24m/s. O autor classifica como condição de pequenas ondas com baixa declividade com evidências para as ondas capilares. A Figura 2.2 (d), onde a velocidade de fricção da fase gasosa é igual a 0,42m/s, mostra um caso de quebra de onda em microescala, relacionada a Figura 2.2 (b).

A partir de 1960, uma série de experimentos (KLINE, REYNOLDS, SCHRAUB e RUNDSRADLER, 1967) *apud* (GREEN, 1995), demonstraram que existem grandes estruturas no escoamento turbulento que ainda não haviam sido observadas pela maior parte da comunidade estudiosa de dinâmica dos fluidos (GREEN, 1995). Este conceito levou a novas reflexões no sentido de não tratar o escoamento turbulento simplesmente como um movimento randômico, mas considerar as denominadas estruturas coerentes.

Existem algumas definições de estruturas coerentes na literatura. A adotada por Venditti et al. (2013) diz que as estruturas coerentes são movimentos do escoamento que tem uma extensão espacial reconhecível e persiste por mais de um período de tempo, contribuindo para processos investigados (como transporte e/ou mistura de matéria, momentum e/ou transferência de energia) e que são distinguíveis de movimentos randômicos do escoamento. Já Adrian (2007), considera as estruturas coerentes como movimentos que possuem uma organização espacial e duram um tempo suficiente para que possam ser capturadas aos olhos em um filme de visualização de escoamento (em um experimento) e/ou que contribuem significativamente para a média estatística no tempo do escoamento.

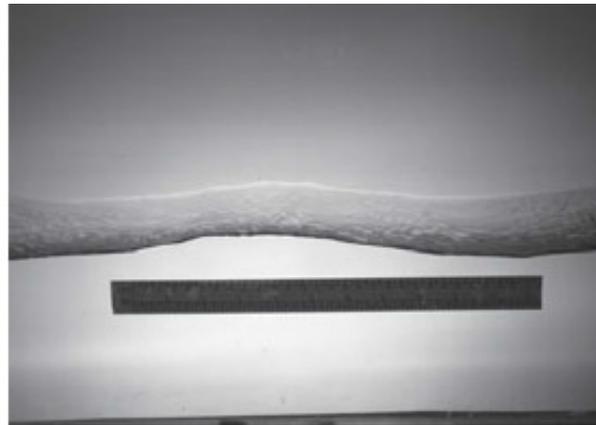
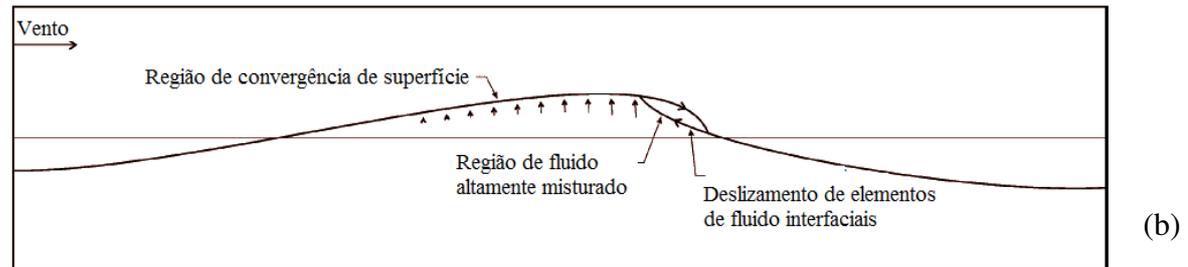
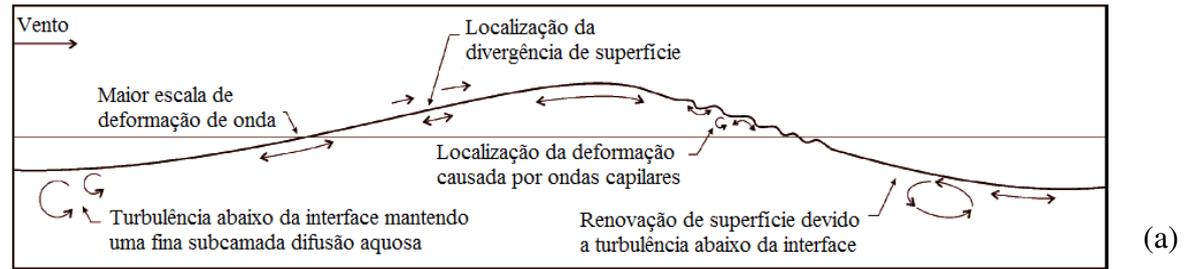


Figura 2.2 - Esquema mostrando os processos identificados na presença de ondas: (a) onda menos íngreme e sem quebra. (b) quebra de onda em microescala. (c) configuração para um caso real da interface sem quebra de onda (d) configuração para um caso real da interface com quebra de onda em microescala.

Fonte: Adaptado de PEIRSON et al., 2014.

A Figura 2.3 traz a formação das estruturas turbulentas a partir de um experimento realizado por Perry et al. (1981) em uma investigação de turbulência em placa plana. Mostrando a transição entre um regime laminar para um regime turbulento, as primeiras estruturas que surgem são as ondas de Tollmien-Schlichting. Estas ondas começam a oscilar na direção transversal ao escoamento e dão origem a vórtices longitudinais que dependendo do seu formato são chamadas de vórtices de grampo de cabelo (*hairpin vortex*). Estas instabilidades são filamentos turbilhonares contra-rotativos que se erguem para o interior da camada limite. A presença destes vórtices contra-rotativos, sugere a formação das faixas (*streaks*) de baixa e alta velocidade. Como uma consequência da instabilidade dos vórtices longitudinais que são elevados a partir da parede, ocorre uma ruptura, dando origem as explosões turbulentas (*burst*) e finalmente a degeneração em turbulência desenvolvida. As explosões turbulentas consistem em processos de ejeção (*ejection*) de fluido de baixa velocidade a partir da parede e na varredura (*sweep*) de fluido de alta velocidade (Venditti et al. 2013) na direção da parede. Assim, pode-se descrever as estruturas coerentes próximas a uma parede em escoamentos turbulentos como faixas velocidade (*streaks*) e vórtices na direção longitudinal que consistem em estruturas tri-dimensionais.

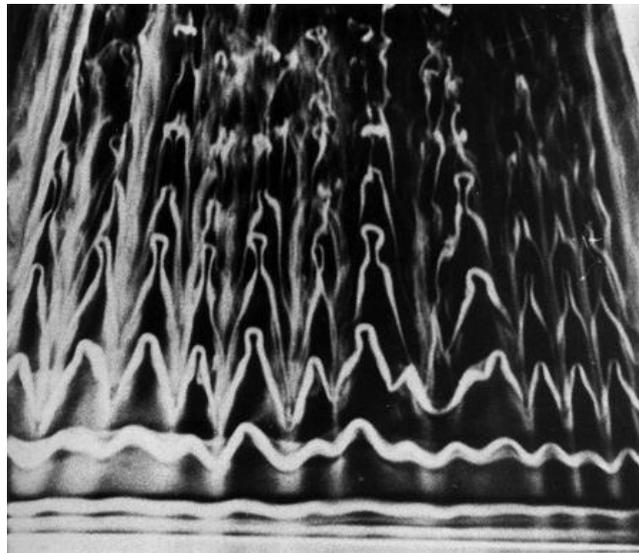


Figura 2.3 - Formação de estruturas coerentes próximas a região de placa plana.

Fonte: Perry et al. (1981)

Vários experimentos e simulações numéricas (RASHIDI e BANERJEE, 1988, LOMBARDI et al., 1996, RASHIDI, 1997, MAGNAUDET e CALMET, 2006, LIN et al., 2008,

HASEGAWA e KASAGI, 2009, LIU et al., 2009, KOMORI et al., 2010, LEE et al., 2012, TURNEY e BANERJEE, 2013 e TAKAGAKI et al., 2015) já foram realizadas com foco somente na presença e desenvolvimento de estruturas turbulentas próximas a interface.

Segundo Banerjee e Macintyre (2004), a questão que se coloca é saber se essas estruturas turbulentas que ocorrem em região de parede também aparecem próximas a interface líquido-gás do lado do líquido. Elas são esperadas na interface para a fase gasosa, uma vez que a superfície é similar a uma região de parede. No entanto, para o líquido, as condições de interface são muito diferentes daquelas em paredes sólidas, e estudos ao longo dos anos vem investigando o que ocorre nesta região.

Para esclarecer este fato, Rashidi e Banerjee (1990) realizaram experimentos em que as estruturas do escoamento próximas à interface foram visualizadas. Os autores verificaram, na interface na fase líquida, o aparecimento de estruturas que vão de regiões de baixa e alta velocidade a explosões turbulentas similares a regiões de parede.

Lombardi et al. (1996) mostrou que regiões de varredura, isto é, movimentos que trazem fluido a partir de outras regiões da fase gasosa para a interface, ocorrem em regiões de alta tensão de cisalhamento. Reciprocamente, ejeções do lado do gás, que carregam fluido para dentro do escoamento, estão fortemente correlacionados com regiões de baixa tensão de cisalhamento na interface. Já a fase líquida, não se comporta desta maneira e as ejeções e varreduras não se correlacionam diretamente com a tensão de cisalhamento na interface.

Shuangfeng et al. (1999) verificaram que o cisalhamento causado pelo vento na interface líquido-gás é a principal fonte geradora de estruturas coerentes próximas a interface e faixas de baixa e alta velocidade aparecem como uma característica marcante dos escoamentos turbulentos nas proximidades da superfície do líquido. O mesmo estudo verificou que, o aumento da velocidade do vento, ou seja, o aumento da tensão de cisalhamento na interface, ocasiona um aumento das faixas de estruturas turbulentas (*streaky*). O estudo experimental de Shuangfeng e Fu (2001), utilizando um tanque com água, verificou que estruturas de faixas de velocidade aparecem pela primeira vez, quando um valor crítico para a velocidade de fricção na fase gasosa é de aproximadamente 0,055 m/s. Os experimentos com bolhas de oxigênio desenvolvidos por Shuangfeng et al. (1999), mostraram que a partir de uma velocidade do vento desenvolvida no topo do tanque em torno de 2,63 m/s, um padrão de escoamento

aparece próximo a interface onde é dominada por um tipo de estruturas de grande escala, os eventos de explosões turbulentas (*burts*).

Estudos como o de Gualtieri e Doria (2008), Liu et al. (2009), Komori et al. (2010), Peirson et al. (2014) e Takagaki et al. (2015), vêm estudando como a superfície deformável com ou sem ondas e as estruturas turbulentas próximas a interface influenciam na transferência de massa de um composto.

2.3 TRANSFERÊNCIA DE MASSA ATRAVÉS DA INTERFACE LÍQUIDO-GÁS

Pela teoria de transferência de massa, haverá fluxo de matéria de uma região de maior para outra de menor concentração de uma determinada espécie química. A diferença de concentração da espécie química, enquanto causa, traduz-se em “força motriz” necessária ao transporte da espécie considerada (CREMASCO, 2009).

A investigação sobre transferência de massa de gases a partir de superfícies líquidas é ampla e pode ser feita de forma experimental (COHEN et al., 1978; MACKAY e YEUN, 1983; RASHIDI e BANERJEE, 1988; LAM e BANERJEE, 1992; AROGO et al., 1999b; CHAO, 2005; SANTOS et al., 2012) auxiliando na construção de modelos algébricos e também na validação de modelos numéricos para o cálculo do coeficiente de transferência de massa da fase líquida e da fase gasosa.

Outra forma de investigar o fenômeno de transferência de massa é utilizando modelos matemáticos. De acordo com Mathpati e Joshi (2007), existem três classes de modelos para prever a transferência de massa (e calor) na interface: os modelos analíticos, os modelos heurísticos e os modelos de mecânica dos fluidos computacional.

Um modelo analítico para o transporte de massa através de uma superfície quiescente exposta a atmosfera já consolidado na literatura é o proposto por Gostelow et al. (2001) e os modelos dos programas computacionais WATER9 (U.S.EPA, 1994), TOXCHEM+ (ENVIROMEGA, 2003). O equacionamento para o coeficiente de transferência de massa para cada um deles é dado em função da velocidade de fricção, velocidade a dez metros de altura, relação de aspecto do tanque (comprimento/altura), viscosidade do fluido e difusividade do composto.

Uma limitação proveniente destes modelos consiste na ausência da modelagem dos efeitos das estruturas turbulentas próximas à superfície e se aplicam a situações bastante específicas para as quais foram baseados, com expressões puramente empíricas. Uma aplicação destes modelos pode ser vista no estudo de Santos et al. (2012).

Mathpati e Joshi (2007) fizeram uma revisão sobre a abordagem heurística existente e juntamente com Turney e Banerjee (2010) e Turney e Banerjee (2013) discutem as formulações para o coeficiente de transferência de massa na interface líquido-gás para cada modelo. Dependendo da formulação para a região próxima à parede, os modelos heurísticos são divididos em vários grupos. Pela ampla aplicação, pode-se citar três desses modelos: teoria dos dois filmes (LEWIS e WHITMAN, 1924), teoria de penetração (HIGBIE, 1935) e modelo de renovação de superfície (DANCKWERTS, 1951). Cada um destes modelos é baseado em uma hipótese distinta sobre o comportamento do líquido próximo a interface líquido-gás. As três abordagens evidenciam que a transferência de massa de um composto depende de uma propriedade de transporte: a difusividade e das condições convectivas que asseguram o contato entre as fases líquida e gasosa, tais como: espessura do filme (LEWIS E WHITMAN, 1924), tempo de contato na interface de um elemento líquido vindo do seio da fase (HIGBIE, 1951) e da taxa de renovação superficial (DANCKWERTS, 1935 e HIGBIE, 1951). Essas grandezas são difíceis de serem estimadas ou medidas experimentalmente, o que nos leva a recorrer a relações empíricas específicas e/ou ao equacionamento matemático mais complexo para descrever todos os fenômenos físicos envolvidos.

Estudos que avaliam a transferência de massa na interface líquido-gás utilizando simulação numérica variam desde aqueles que consideram um tanque com uma fase líquida em regime laminar, onde a superfície líquida quiescente é caracterizada pelo baixo grau de perturbação na interface, (CUESTA et al., 1999, LIMPT et al. 2005 e FERONI et al., 2012), passando por estudos que consideram simulação apenas da fase líquida em regime turbulento (NAGAOSA, 1999, DONG et al., 2003, MAGNAUDET e CALMET, 2006), assumindo que os mecanismos de transporte na fase gasosa não são fatores limitantes do processo.

Para analisar as interações que acontecem na interface líquido-gás e obter resultados mais conclusivos sobre o escoamento e a transferência de massa, os estudos multifásicos vêm ganhando espaço. Estes estudos consideram uma fase líquida e uma fase gasosa com uma interface de transferência entre elas (HASEGAWA e KASAGI, 2009, LIU et al., 2009,

DESOUTTER et al., 2009, KOMORI et al., 2010, TURNEY e BANERJEE, 2013 e TAKAGAKI et al., 2015). Detalhes sobre a transferência de massa em escoamentos multifásicos são vistos na seção seguinte.

2.3.1 Análise da transferência de massa na interface líquido-gás em escoamento multifásico turbulento

A Figura 2.4 mostra o movimento de um componente A através da interface, uma interpretação visual da teoria dos dois filmes (LEWIS e WHITMAN, 1924). A transferência de massa de um composto A na interface entre as fases α e β ocorre quando não houver equilíbrio químico do composto nas fases. Assim, faz-se necessário definir o fluxo de transferência de massa do composto A entre as fases ($J_{\alpha\beta}^A$). Pela Lei de Fick, tem-se:

$$J_{\alpha\beta}^A = -D_A \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.2)$$

onde D_A é o coeficiente de difusão da espécie A no meio e $\partial C/\partial y$ é o gradiente de concentração da espécie que será transportada na direção vertical y .

Na Figura 2.4, $J_{\alpha\beta}^A$ é o fluxo de transferência de massa do composto A entre as fases; $M_{A\alpha i}$ (ou $C_{A\alpha i}$) e $M_{A\beta i}$ (ou $C_{A\beta i}$) são as concentrações molares (ou mássica) do composto A na interface, na fase α e na fase β , respectivamente. $M_{A\alpha b}$ (ou $C_{A\alpha b}$) e $M_{A\beta b}$ (ou $C_{A\beta b}$) são as concentrações molares (ou mássica) do composto A no seio da fase, na fase α e na fase β , respectivamente.

Enquanto que em regiões distantes da interface líquido-gás a turbulência domina o transporte dos gases, próximo à fronteira, as propriedades viscosas do líquido atenuam os movimentos turbulentos dando origem ao desenvolvimento de camadas limite de concentração (d_α e d_β) (ou sub-camadas) nos dois lados da interface líquido-gás. Nas camadas limites de concentração o processo de transferência de massa acontece predominantemente por difusão. Por estas camadas representarem a resistência à transferência de gases, um gradiente de

concentração ocorre nessa camada gerando um perfil de concentração. Na região fora da camada de concentração, onde o transporte é dominado pela turbulência, a concentração mostra-se constante (ocorre uma mistura). Pode-se assumir que o fluxo de um composto é proporcional ao gradiente de concentração existente entre a interface e o seio da fase (*bulk*).

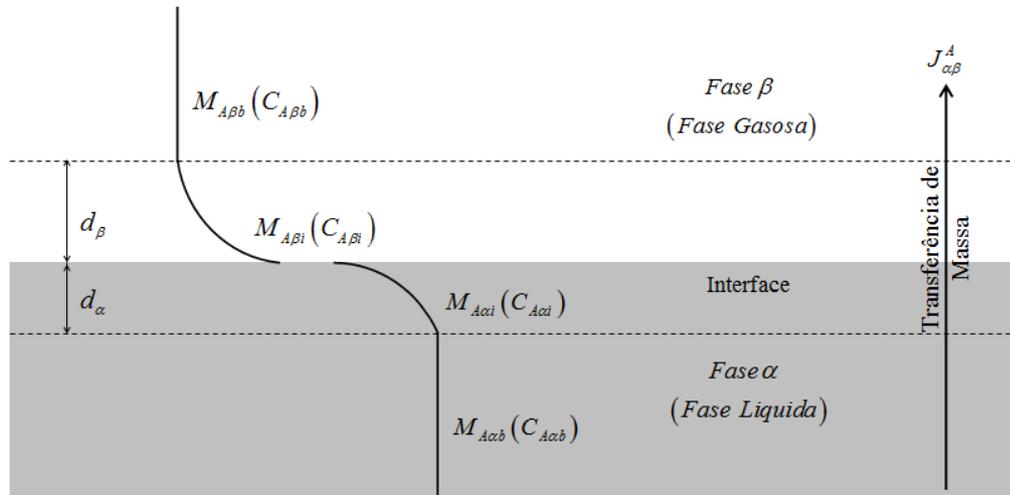


Figura 2.4 - Movimento de um componente A através da interface entre duas fases.

As seguintes relações podem ser consideradas a partir das concentrações escritas na base molar e mássica, para ambas as fases, α ou (β):

$$C_{A\alpha(\beta)} = MM_A \cdot M_{A\alpha(\beta)} \quad (2.3)$$

$$X_{A\alpha(\beta)} = \frac{M_{A\alpha(\beta)}}{M_{\alpha(\beta)}} \quad (2.4)$$

$$y_{A\alpha(\beta)} = \frac{C_{A\alpha(\beta)}}{C_{\alpha(\beta)}} \quad (2.5)$$

onde,

$X_{A\alpha(\beta)}$ fração molar do componente A na fase α ou na fase β .

$y_{A\alpha(\beta)}$ fração mássica do componente A na fase α ou na fase β .

MM_A é massa molecular do composto A.

$M_{A\alpha(\beta)}$ é a concentração molar do composto A na fase α ou na fase β .

$M_{\alpha(\beta)}$ é a concentração molar total da fase α ou da fase β .

Assim, os fluxos molares podem ser dados por:

$$n_{A\alpha} = k_{\alpha} (M_{A\alpha b} - M_{A\alpha i}) \quad (2.6)$$

e

$$n_{A\beta} = k_{\beta} (M_{A\beta i} - M_{A\beta b}) \quad (2.7)$$

onde,

$n_{A\alpha}$ é o fluxo molar do componente A do seio da fase α (*bulk*) até a interface. $n_{A\beta}$ é o fluxo molar do componente A do seio da fase β até a interface.

k_{α} e k_{β} são os coeficientes de transferência de massa locais, da fase α e da fase β , respectivamente, definidos em cada lado da interface.

Multiplicando-se as equações (2.6) e (2.7) pela massa molecular do composto (MM_A) A , tem-se:

$$J_{A\alpha} = k_{\alpha} (C_{A\alpha b} - C_{A\alpha i}) \quad (2.8)$$

e

$$J_{A\beta} = k_{\beta} (C_{A\beta i} - C_{A\beta b}) \quad (2.9)$$

onde, $J_{A\alpha}$ é o fluxo de massa do componente A do seio da fase α até a interface, $J_{A\beta}$ é o fluxo de massa do componente A do seio da fase β até a interface.

Para evitar a necessidade de saber os valores do composto na interface, é conveniente expressar as variáveis por meio de uma constante de proporcionalidade. Considerando que $M_{A\beta i} = f(M_{A\alpha i})$ é a função que relaciona as duas concentrações no equilíbrio.

Todas as não linearizações associadas a essa função estarão na constante de proporcionalidade (K_H), da seguinte forma:

$$M_{A\beta i} = K_H M_{A\alpha i} \quad (2.10)$$

e

$$C_{A\beta i} = K_H C_{A\alpha i} \quad (2.11)$$

Considerando a existência do equilíbrio termodinâmico na interface e supondo válida a teoria das duas resistências, pode-se estabelecer a continuidade do fluxo de A na interface entre as fases (CREMASCO, 2009). Assim, combinando as Equações (2.8), (2.9) e (2.11), pode-se determinar a concentração em massa na interface como:

$$\frac{C_{A\beta i}}{K_H} = C_{A\alpha i} = \frac{k_\alpha C_{A\alpha b} + k_\beta C_{A\beta b}}{K_H k_\beta + k_\alpha} \quad (2.12)$$

Combinando as Equações (2.8), (2.9) e (2.12) e considerando o sistema bifásico líquido-gás sendo a fase α a líquida (l) e a fase β a gasosa (g), tem-se:

Para a fase líquida:

$$J_{Al} = K_l \left(C_{Alb} - \frac{C_{Agb}}{K_H} \right) \quad (2.13) \quad \text{com} \quad \frac{1}{K_l} = \frac{1}{k_l} + \frac{1}{k_g K_H} \quad (2.14)$$

Para a fase gasosa:

$$J_{Ag} = K_g (C_{Alb} K_H - C_{Agb}) \quad (2.15) \quad \text{com} \quad \frac{1}{K_g} = \frac{K_H}{k_l} + \frac{1}{k_g} \quad (2.16)$$

onde K_l e K_g são os coeficientes globais de transferência de massa da fase líquida e da fase gasosa respectivamente.

Segundo Cremasco (2009), o valor de K_H pode ser determinado por uma constante de equilíbrio como a dada pelo número de Henry. Esta constante é necessária devido a presença de uma descontinuidade de concentração no equilíbrio de fases na interface.

Em Sander (1999) estão descritas algumas formas de escrever o número de Henry ou a constante de Henry. Uma delas é a Equação (2.17) também apresentada nos trabalhos de Liu et al. (2009) e Haroun et al. (2010):

$$K_H = \frac{C_{Ali}}{C_{Agi}} \quad (2.17)$$

Pode-se concluir das Equações (2.14) e (2.16) que para uma fase líquida, um composto altamente solúvel em água, K_H é muito pequeno e assim, verifica-se que:

$$\frac{1}{K_g} \simeq \frac{1}{k_g} \quad (2.18)$$

Neste caso, diz-se que a resistência da fase gasosa é a controladora do processo de transferência de massa.

Por outro lado, para um escoamento envolvendo uma fase líquida com um composto pouco solúvel em água, a constante K_H é muito grande fazendo com que $1/K_H \rightarrow 0$ assim,

$$\frac{1}{K_l} \simeq \frac{1}{k_l} \quad (2.19)$$

Neste caso, pode-se dizer que a resistência da fase líquida é a controladora do processo de transferência de massa.

O estudo de Hudson e Ayoko (2008) traz a Figura 2.5, relacionando a constante de Henry com o processo de transferência de massa. Verifica-se que quando a constante de Henry (K_H) tem uma ordem de grandeza em torno de 10^{-3} , denominada constante de Henry crítica (K_{Hcrit}), a resistência à transferência de massa na região próxima à interface em ambas as fases (líquida e gasosa) é equivalente. Quando valores de K_H são significativamente menores do que 10^{-3} , os processos que ocorrem na fase gasosa são os limitantes para a transferência de

massa, enquanto que para valores de K_H significativamente maiores do que 10^{-3} , os processos que ocorrem na fase líquida são os limitantes para a transferência.

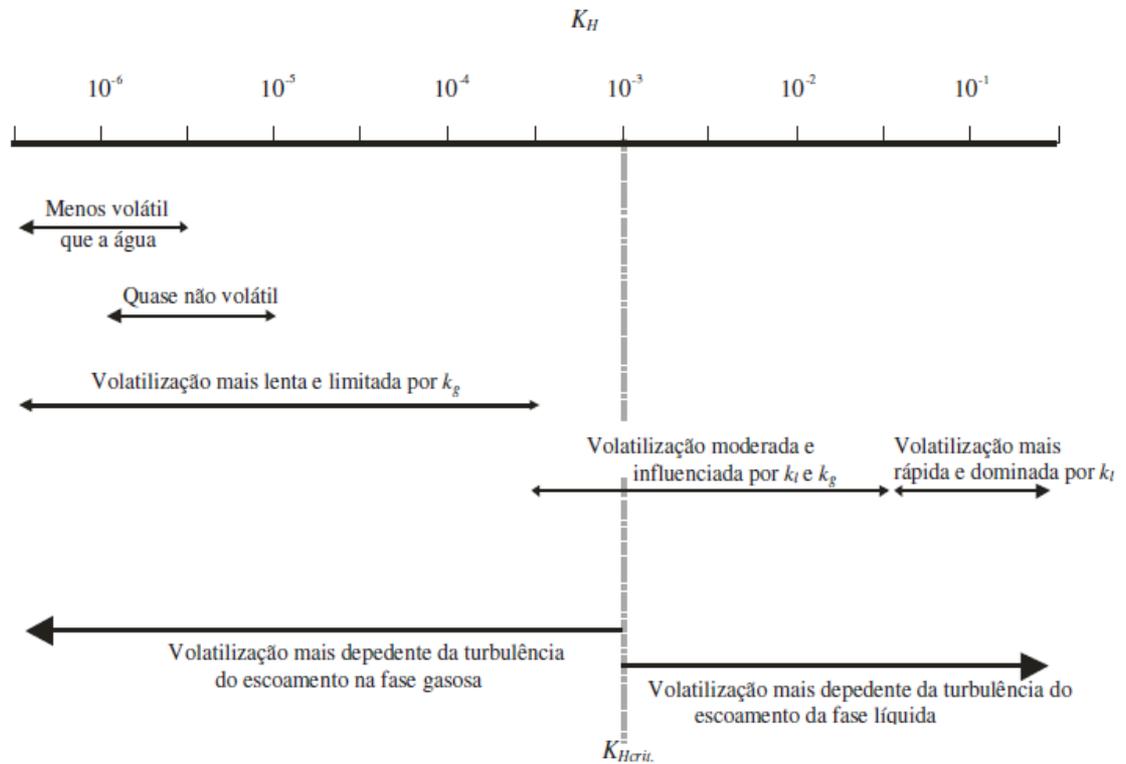


Figura 2.5- Relação entre a constante de Henry e o processo de transporte nas fases líquida e gasosa em relação ao processo global de transferência.

Fonte: Adaptado de HUDSON e AYOKO, 2008.

A Figura 2.6 mostra exemplos de substâncias que apresentam resistência à transferência de massa preponderante na fase líquida, gasosa e em ambas as fases.

A constante de Henry leva em conta o peso molecular, a solubilidade e a pressão de vapor, e indica o grau de volatilidade de um composto químico em uma solução. Quando o composto químico tem uma alta solubilidade na água com relação a sua pressão de vapor, o composto se dissolverá principalmente em água. Quando a pressão de vapor é relativamente alta em relação a sua solubilidade em água, a constante de Henry também é alta e o composto químico tem uma tendência a se encontrar na fase gasosa, ou seja, no ar.

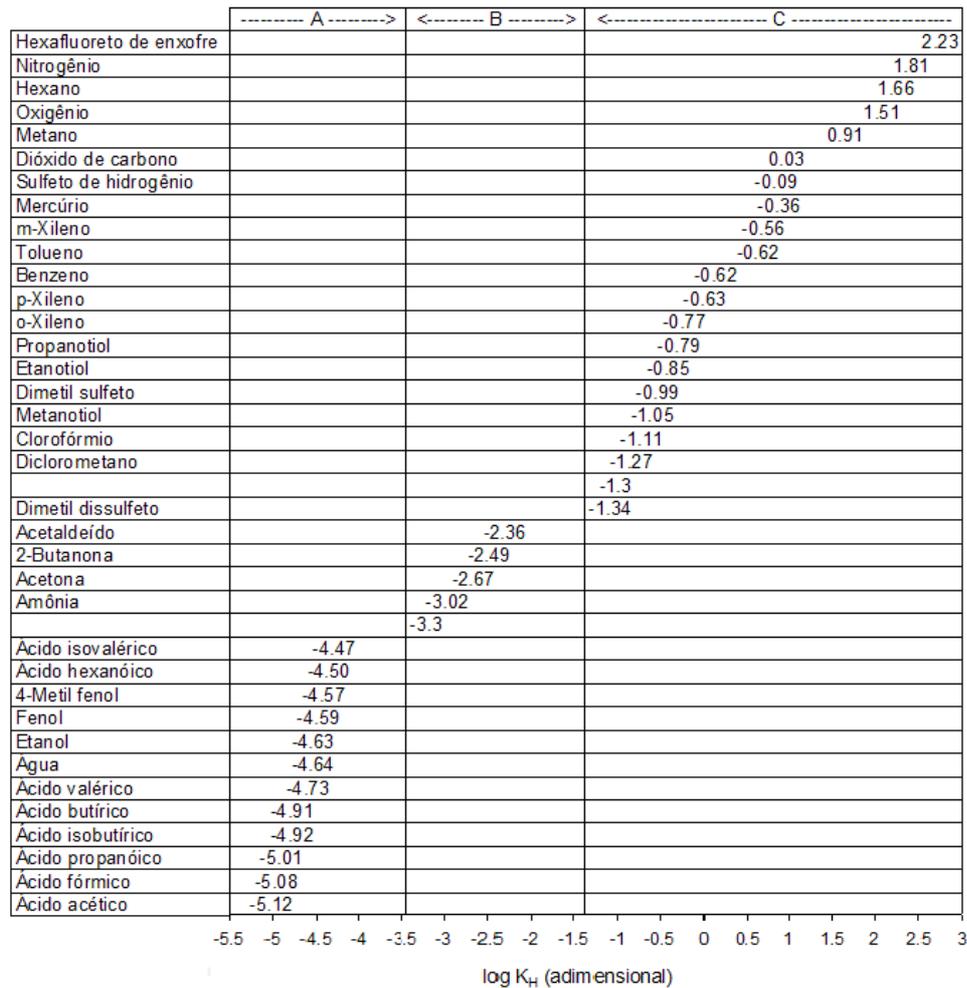


Figura 2.6 - Constante de Henry para diversas substâncias, considerando uma interface água-ar. As faixas A, B e C indicam, respectivamente, as substâncias que apresentam resistência predominante no ar, em ambas as fases e na água.

Fonte: Adaptado de HUDSON e AYOKO, 2008.

O estudo de Liu et al. (2009), com um escoamento multifásico de uma fase líquida sendo a água e uma fase gasosa sendo o ar, quantificou a transferência de massa de um composto da fase gasosa para a líquida, em um tanque, em relação a dois valores diferentes para a constante de Henry iguais a 1 e 10^{-3} . Os autores verificaram que a variação desta constante tem uma influência importante na estimativa da transferência de massa para o tempo adimensional de 9,9 analisado. Para o caso em que K_H é igual a uma unidade, o perfil de concentração se mostrou quase que contínuo na interface e a fase líquida é a controladora do processo de transferência de massa. Os valores adimensionados pela concentração inicial do ar mostraram que a concentração em ambas as fases não tiveram grande alteração sendo a concentração de interface na fase gasosa igual a 0,96. Para o caso em que K_H é igual a 10^{-3} , as

diferenças de concentrações mostram-se bem maiores que no caso anterior. O perfil de concentração na fase gasosa mostrou que a concentração para o seio da fase caiu de um para um valor em torno de 0,58 enquanto que na interface gasosa este valor é bem próximo de zero.

Um terceiro parâmetro de fundamental importância para a análise da transferência de massa na interface líquido-gás, juntamente com o número de Reynolds e a constante da lei de Henry, é o número de Schmidt (Sc). Ele é dado por:

$$Sc = \frac{\nu}{D_A} \quad (2.20)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido e D_A é o coeficiente de difusão da espécie A . Este número representa a relação entre os fenômenos de transferência de quantidade de movimento e transferência de massa a nível molecular, indicando a relação entre as forças viscosas e o fenômeno da difusão.

Quando considera-se a transferência de massa a partir de um líquido, o número de Schmidt é comumente alto, da ordem de 10^2 a 10^3 e o mecanismo de transporte ocorre em uma fina camada de concentração próxima à interface, com espessura na ordem de 0,01 a 0,1 milímetros para a fase líquida (HASEGAWA e KASAGI, 2007, SUGA e KUBO, 2010).

Em muitos estudos numéricos que utilizam a modelagem DNS e LES, percebe-se que o número de Schmidt utilizado costuma ser próximo a uma unidade como é o caso dos estudos de Dong et al. (2003), Magnaudet e Calmet (2006), Hasegawa e Kasagi (2009), Liu et al. (2009), Komori et al. (2010) e Takagaki et al. (2015). Este valor é utilizado devido a alta discretização espacial que valores altos de Schmidt exigem. Segundo Magnaudet e Calmet (2006) para simulações numéricas de transferência de massa deve existir no mínimo três pontos nodais dentro da camada difusiva de concentração que é dada por $hSc^{-1/2} Re^{-3/4}$. Neste caso, a medida h está relacionada a altura do domínio computacional. Percebe-se na expressão que a camada difusiva é dada pelo inverso dos números de Reynolds e Schmidt. Assim, fazendo uma análise matemática, quanto maiores forem estes números, menor espessura terá a

camada difusiva e mais refinada terá que ser a malha próxima a interface, aumentando o custo computacional da simulação.

Como pode ser visto no estudo de Cuesta et al. (1999) onde o escoamento em um tanque em regime laminar foi estudado, o comprimento da camada difusiva de concentração mostra-se maior para números de Schmidt menores. Outra conclusão dos autores é que o valor de k_l aumenta com o aumento do número de Reynolds e diminui com o aumento do número de Schmidt. Continuando essa discussão, Dong et al. (2003) relatam que em escoamentos turbulentos a camada limite difusiva é muito fina e a transferência de massa é controlada pelos movimentos do fluido próximo a interface. Zappa et al. (2003) e Gualtieri e Doria (2008) relatam que os vórtices turbulentos ajudam a diminuir a espessura da camada limite de concentração. Dessa forma, aumentam o gradiente de concentração entre a interface e o seio da fase, o que faz com que a transferência de massa seja maior quando comparado a um caso laminar ou com baixo número de Reynolds.

Ainda segundo Gualtieri e Doria (2008), vórtices turbulentos muito próximos à interface líquido-gás causam movimentos dentro da subcamada limite de concentração, aumentando assim a difusividade efetiva. Assim, a transferência de massa é novamente maior que de uma região estagnada. É importante estudar a turbulência próxima a interface líquido-gás, uma vez que, o processo de transferência de um gás entre as fases líquida e gasosa, depende das propriedades da espécie a ser transferida e das interações turbulentas que ocorrem dos dois lados próximo a interface.

Lakehal et al. (2003) encontrou fluxos de calor maiores em uma interface com ondulações quando comparada a uma interface indeformável para diferentes números de Prandtl estudados. Isto implica que a deformação da interface leva ao aumento do fluxo vertical de transferência de calor quando comparado a uma superfície indeformável. A explicação dada pelos autores para esta diferença, é que as ondas aumentam o campo de flutuação de velocidade normal a interface como mostrado no estudo de Fulgosi et al. (2003). Dessa forma, os autores verificaram que assim como o escoamento, o fluxo de energia também se correlaciona com a velocidade de fricção calculada a partir da tensão de cisalhamento.

Correlacionando a turbulência próxima a interface com a transferência de massa, conforme citado anteriormente, Banerjee et al. (2004) mostram que as ejeções no lado do gás surgiram

ao longo de regiões com baixa tensão de cisalhamento, enquanto as varreduras, que trazem fluido de alta velocidade em direção a interface, estão associadas a regiões de alta tensão de cisalhamento. Assim, regiões com alta tensão de cisalhamento se correlacionam com regiões de alto fluxo de escalar e regiões de baixa tensão de cisalhamento se correlacionam com regiões de baixo fluxo de escalar. Por outro lado, o mesmo fenômeno não aparece no lado do líquido. Isto se deve ao fato do escoamento da fase gasosa próxima à interface ter característica de região de parede com cisalhamento, enquanto que no lado líquido da interface não se segue este mesmo padrão. O mesmo foi mostrado por De Angelis et al. (1999), que observou que altas ou baixas tensões de cisalhamento não estão correlacionadas com ejeções e varreduras do lado do líquido. Por outro lado, os autores conseguiram correlacionar o fluxo de massa alto com regiões de varredura enquanto baixos fluxos de massa foram relacionados as regiões de ejeções do lado do líquido.

O estudo de Herlina e Jirka (2008) e Komori et al. (2010) relacionam a presença das estruturas em forma de cogumelos com a transferência de massa. Alta concentração de escalar é observada abaixo da interface ao longo do tempo na região de crista em um plano transversal ao escoamento. A ejeção de estruturas leva concentração da interface para o interior do tanque, diminuindo a camada de concentração próxima a interface, aumentando o gradiente de concentração, e assim, aumentando também o fluxo de escalar. Por outro lado, como fluido foi jogado da interface para o interior do tanque esta região é substituída por fluido vindo do interior do tanque, rico em concentração de composto auxiliando também o processo de transferência. Neste caso, a fase líquida possui composto dissolvido em um tempo inicial.

Assim como os estudos anteriores, Komori et al. (2010) e Takagaki et al. (2015), verificaram em seus estudos de DNS, ao simular um tanque em escoamento multifásico, que a presença de faixa de baixa velocidade na presença de uma superfície com ondas sugere que a transferência de massa através da superfície livre com deformações é também dominada pelos vórtices longitudinais relacionados aos movimentos de explosão turbulenta do lado do líquido. Além disso, o estudo mostrou que o fluxo local de transferência de massa é mais alto para a simulação que possui superfície com deformação quando comparada com a simulação com superfície indeformável. Isto se deve ao fato de que a superfície com ondas aumenta a turbulência e, portanto aumenta a frequência de aparecimento de vórtices longitudinais relacionados aos movimentos de explosão do lado do líquido. Picos de fluxo de massa foram

encontrados em regiões de ondas capilares (*ripples*), o que intensifica o fato de que o aumento da turbulência na interface aumenta a transferência de composto. Estas ondas possuem característica de alta vorticidade e podem desempenhar papel importante na troca de fluido na interface. No estudo de Peirson et al. 2014, os autores identificaram processos, provavelmente interdependentes que relatam a ação e a intensidade da turbulência próxima a região de interface misturando elementos de fluido em eventos de ejeções e varreduras e diminuindo a camada difusiva de concentração auxiliando na transferência de massa.

Dessa forma, a partir dos estudos citados, verifica-se que as estruturas turbulentas tem influência importante na transferência de massa através da interface líquido-gás e as deformações da interface alteram significativamente o transporte de massa do composto.

3 METODOLOGIA

Neste capítulo será descrita a metodologia utilizada para estudar o escoamento multifásico em um tanque contendo ar e água com um composto dissolvido em uma das fases que será transferido para a segunda fase através da interface líquido-gás. A Figura 3.1 é uma representação esquemática do domínio de estudo. A parte superior corresponde a fase gasosa, que para o presente trabalho é o ar. A parte inferior corresponde a fase líquida que para o presente trabalho é a água. Entre os dois fluidos tem-se a interface líquido-gás, onde ocorrem os processos de transferências entre as fases.

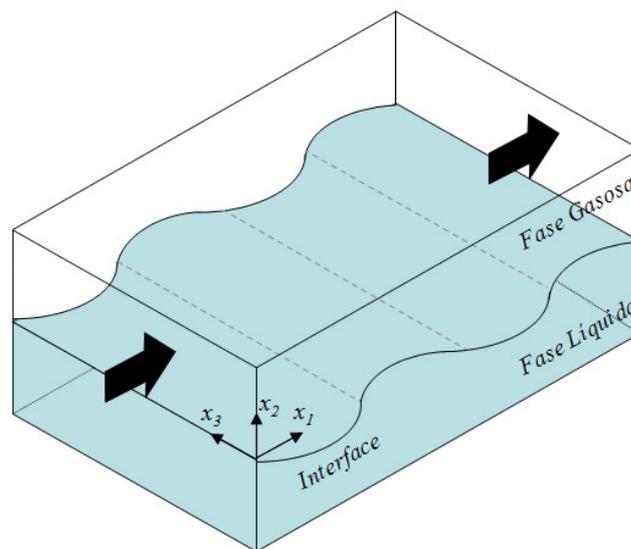


Figura 3.1 - Representação esquemática 3D do problema proposto.

3.1 MODELAGEM MATEMÁTICA

Escoamentos multifásicos líquido-gás aparecem em processos naturais e industriais em várias formas e muitas vezes apresentam complexa transferência de massa, quantidade de movimento, concentração da espécie e energia entre as fases. A complexa natureza dos escoamentos multifásicos em contraste com os escoamentos de fase simples acontece por causa da existência de alteração dinâmica na interface, ocasionando descontinuidade das propriedades (por exemplo, viscosidade e massa específica). Quando uma ou ambas as fases tornam-se turbulenta, complexidades adicionais ocorrem nas interações entre os vórtices turbulentos, as estruturas interfaciais e trocas entre as fases (YEOH e TU, 2009).

Quando um sistema de escoamento de duas ou mais fases possui uma interface com precisa identificação, pode-se modelar essa categoria de fluxo multifásico por meio de duas abordagens: o modelo homogêneo e o modelo não homogêneo (ou modelo de fluidos separados) (YEOH e TU, 2009). Enquanto no modelo não-homogêneo são resolvidas equações de momentum e demais equações de conservação para cada fase individualmente, o modelo homogêneo baseia-se na utilização de apenas um conjunto de equações para ambas as fases, sendo algumas propriedades físicas (viscosidade, massa específica...) dependente da concentração de cada fase. O modelo não homogêneo é recomendado para escoamentos com superfície livre em que as fases não estão totalmente separadas e possuem velocidades relativas diferentes entre si (Paladino, 2005). Por outro lado, quando as interfaces são bem definidas, o modelo homogêneo mostra-se mais adequado devido ao reduzido esforço computacional podendo chegar a ter um custo computacional 2,3 vezes menor que o modelo não homogêneo, como no trabalho de Godderidge et al. (2009).

3.1.1 Modelo Homogêneo e equações governantes

Uma das características do escoamento multifásico homogêneo é que um campo de escoamento comum é compartilhado por todos os fluidos. Para um dado processo de transporte, o modelo homogêneo assume que as quantidades transportadas para aquele processo (com exceção da fração de volume) são as mesmas para todas as fases (YEOH e TU, 2009). Dessa forma, pode-se resolver os campos compartilhados usando uma equação de transporte simplificada em lugar da solução individual da equação de transporte para cada fase. Como simplificação, no modelo homogêneo, assume-se que a velocidade de cada fase é igual a velocidade da mistura, assim,

$$\bar{u}_\alpha = \bar{u} \text{ com } 1 \leq \alpha \leq N_p \quad (3.1)$$

onde, α indica a fase e N_p o número total de fases. \bar{u}_α é o vetor velocidade da fase α e \bar{u} é o vetor velocidade da mistura.

Para escrever as equações governantes do problema, primeiro serão feitas algumas considerações: (i) o problema é considerado como escoamento de superfície livre; (ii) a simulação multifásica será realizada considerando a fase gasosa como o ar, com um composto dissolvido e a fase líquida como a água com um composto dissolvido; (iii) geometria tridimensional como esquema visto na Figura 3.1; (iv) isotérmico; (v) incompressível; (vi) escoamento turbulento será considerado para a fase líquida e para a fase gasosa; (vii) escoamento em regime transiente. Dessa forma, as equações governantes de conservação de massa, conservação de quantidade de movimento e conservação da espécie química para o modelo multifásico homogêneo, onde o subíndice l indica a fase líquida, g indica a fase gasosa e mix indica a mistura das fases, são:

- *Conservação da Massa:*

Para a fase líquida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l) + \frac{\partial}{\partial x_j}(r_l \rho_l u_j) = 0 \quad (3.2)$$

Para a fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_g \rho_g) + \frac{\partial}{\partial x_j}(r_g \rho_g u_j) = 0 \quad (3.3)$$

- *Conservação da Quantidade de Movimento:*

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{mix} u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_{mix} u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho_{mix} g_i + F_{\alpha\beta} \quad (3.4a)$$

onde

$$\tau_{ij} = \mu_{mix} S_{ij} = \mu_{mix} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.4b)$$

onde x_i são as coordenadas cartesianas nos eixos [L], u_i são as componentes da velocidade da mistura na direção i [$L t^{-1}$], P é a pressão termodinâmica [$M L^{-1} t^{-1}$], ρ_{mix} é a massa específica da mistura [$M L^{-3}$], μ_{mix} é viscosidade dinâmica da mistura [$M L^{-1} t^{-1}$] ponderadas pela fração de volume entre as fases. t é o tempo [t]. r_l, r_g, ρ_l e ρ_g são a fração de volume [] e a massa específica [$M L^{-3}$] para a fase líquida e gasosa, respectivamente. g_i é o vetor aceleração gravitacional [$L t^{-2}$], S_{ij} é o tensor deformação [t^{-1}], τ_{ij} é o tensor das tensões [$M L^{-1} t^{-2}$], $F_{\alpha\beta}$ é a força devido a tensão superficial [$L M t^{-2}$] que será discutida no decorrer deste capítulo. As dimensões são escritas em: massa [M], comprimento [L] e tempo [t].

As frações de volume (r) são assumidas como distintas para cada fase. Observa-se que a equação de conservação de quantidade de movimento é uma equação de transporte para uma fase simples, com massa específica e viscosidade que podem variar.

- *Conservação da espécie química A na fase:*

Para o transporte de massa de um componente dissolvido em uma das fases, a abordagem multicomponente pode ser utilizada. Ao contrário do escoamento multifásico, em um escoamento multicomponente, considera-se que os diversos componentes de um fluido estão misturados a nível molecular (DREW e PASSMAN, 1998). Este tipo de escoamento pode também ser chamado simplesmente de mistura. Os componentes desse escoamento compartilham o mesmo campo de velocidade, temperatura e pressão.

No escoamento multifásico com multicomponente, a equação de transporte para a fração de massa do composto A é dada por:

Para a fase líquida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_l \rho_l y_{Al}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(r_l \rho_l u_j y_{Al}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(r_l \rho_l D_{Al} \frac{\partial}{\partial x_j} y_{Al} \right) = J_{Al} \quad (3.5)$$

Para a fase gasosa:

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_g \rho_g y_{Ag}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(r_g \rho_g u_j y_{Ag}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(r_g \rho_g D_{Ag} \frac{\partial}{\partial x_j} y_{Ag} \right) = J_{Ag} \quad (3.6)$$

onde,

y_{Al} e y_{Ag} são a fração mássica do composto A na fase líquida e gasosa, respectivamente. D_{Al} e D_{Ag} são o coeficiente de difusão da espécie na fase líquida e gasosa, respectivamente. J_{Al} e J_{Ag} representam a transferência das espécies químicas entre as fases líquida e gasosa, respectivamente.

- Equações adicionais:

Quando as equações de conservação da massa e a equação de conservação da espécie química individuais de cada fase são resolvidas, as frações volumétricas (e consequente determinação da interface) e concentrações de composto para cada fase são determinadas, com a restrição de que:

$$\text{O somatório das frações de volume é igual a unidade: } r_l + r_g = 1 \quad (3.7)$$

O método de acompanhamento da posição da superfície livre é o método de volume de fluido (VOF), que será descrito na Seção 3.1.2. Quando a fração de volume é igual a um, indica que o volume de controle está ocupado pelo líquido. Por outro lado, quando a fração de volume é igual a zero, indica que o volume de controle contém a fase gasosa.

A fração mássica do componente A em determinada fase com N_c sendo o número de componentes é dada por:

$$\sum_A^{N_c} y_{A\alpha} = 1 \quad (3.8)$$

Além disso, para o fechamento do sistema de equações considera-se o compartilhamento do campo de pressão para todas as fases:

$$P_\alpha = P \text{ com } 1 \leq \alpha \leq N_p \quad (3.9)$$

Nas equações de conservação aparecem termos relacionados à mistura que a partir da definição de fração de volume são dados por (YEOH e TU, 2009):

$$\rho_{mix} = r_l \rho_l + r_g \rho_g \quad (3.10)$$

$$\mu_{mix} = r_l \mu_l + r_g \mu_g \quad (3.11)$$

As Equações (3.10) e (3.11) são, em geral, utilizadas para o cálculo da massa específica e da viscosidade da mistura.

- Para o fechamento da equação de transferência de massa da espécie química, admite-se que na interface, exista a continuidade do fluxo entre as fases, ou seja, o fluxo da fase líquida é igual ao fluxo da fase gasosa, $J_{Al} = J_{Ag}$, a menos do sinal. O fluxo pode ser escrito como:

$$J_{Al} = D_{Al} \frac{\partial C}{\partial y} \quad (3.12)$$

e

$$J_{Ag} = D_{Ag} \frac{\partial C}{\partial y} \quad (3.13)$$

Admitindo-se que, a malha computacional do presente trabalho atende ao critério de possuir pelo menos três pontos dentro da camada difusiva de concentração (MAGNEUDET e CALMET, 2006), e esta malha é uniforme em seu tamanho na direção normal ao escoamento, em toda a região compreendida pela camada de concentração, optou-se por escrever os fluxos da seguinte forma:

$$J_{Al} = D_{Al} \frac{C_{Al(i-\Delta y)} - C_{Ali}}{\Delta y} \quad (3.14)$$

$$J_{Ag} = D_{Ag} \frac{C_{Ag(i)} - C_{Ag(i+\Delta y)}}{\Delta y} \quad (3.15)$$

onde, C_{Ali} e $C_{Ag(i)}$, são as concentrações na interface, das fases líquida e gasosa, respectivamente. $C_{Al(i-\Delta y)}$ e $C_{Ag(i+\Delta y)}$ são as concentração no primeiro volume de controle abaixo da interface, para a fase líquida, e acima da interface, para a fase gasosa, respectivamente.

Os fluxos escritos nas equações (3.14) e (3.15) consideram apenas a contribuição laminar do processo de transferência de massa do composto, assim a difusão molecular é a única contribuição para a transferência de massa nesta região. Dessa forma, pode-se obter um coeficiente de transferência de massa modificado. As equações (3.16) e (3.17), mostram os coeficientes de transferência de massa da fase líquida (k_l) e o da fase gasosa (k_g):

$$k_l = \frac{D_{Al}}{\Delta y} \quad (3.16)$$

$$k_g = \frac{D_{Ag}}{\Delta y} \quad (3.17)$$

Substituindo as equações (3.16) e (3.17) nas equações (3.14) e (3.15), respectivamente, e assumindo que $J_{Al} = J_{Ag}$, tem-se, a partir da constante de equilíbrio de concentração na interface, neste caso, a constante de Henry, as expressões para os coeficientes de transferência de massa globais da fase líquida (K_L) e da fase gasosa (K_G):

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_l} + \frac{1}{k_g K_H} \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{K_G} = \frac{K_H}{k_l} + \frac{1}{k_g} \quad (3.19)$$

3.1.2 Modelos de escoamento multifásico

A imiscibilidade de dois fluidos que gera uma superfície livre é um resultado da forte força de coesão que existe entre as suas moléculas (YEOH e TU, 2009). Lakehal et al. (2002) faz uma discussão sobre os métodos de rastreamento de interface mais frequentemente empregados em escoamentos multifásicos. Entre os métodos de volume de fluidos citados está o Volume de Fluido (*Volume of Fluid* (VOF)) de Hirt e Nichols (1981), que segundo Hassanvand e Hashemabadi (2011) é o método mais frequentemente utilizado para simulações multifásicas de fluidos imiscíveis. No VOF cada volume de controle (com exceção da interface) possui

apenas uma fase, assim, quando de um lado da interface a fração de volume é um (fase líquida) do outro a fração de volume é zero (fase gasosa) (YEOH e TU, 2009 e HANSCH et al., 2013). No caso de uma abordagem de dois fluidos a descontinuidade na interface líquido-gás é substituída por um gradiente de fração de volume, assim na interface coexistem ambos os fluidos (HANSCH et al., 2013). Essa abordagem ajuda a evitar a difusão numérica já que ocorre um grande gradiente de massa específica e viscosidade na interface. O presente trabalho utilizará um modelo do tipo Volume de Fluido como um esquema de captura de interface onde o modelo VOF de Hirt e Nichols (1981) será empregado.

Para o modelo homogêneo, quando é aplicada a hipótese das velocidades iguais para todas as fases é importante assumir os efeitos de tensão superficial, termo adicional que aparece na equação de quantidade de movimento (YEOH e TU, 2009). O modelo de tensão superficial de Brackbill et al. (1992) estabelece para um fluido primário α (fase líquida - representa o fluido mais denso) e um fluido secundário β (fase gasosa - representa o fluido menos denso), a força de tensão superficial dada por:

$$F_{\alpha\beta} = f_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.20)$$

onde,

$$\delta_{\alpha\beta} = |\nabla r_{\alpha}| \quad (3.21)$$

O termo $\delta_{\alpha\beta}$ é chamado de função delta de interface, sendo nulo fora da interface, assegurando assim que a força de tensão de superfície só é ativada perto da interface.

O termo $f_{\alpha\beta}$ é dado por:

$$f_{\alpha\beta} = -\sigma_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta} \vec{n}_{\alpha\beta} \quad (3.22)$$

onde $\sigma_{\alpha\beta}$ é a tensão superficial do fluido, $\vec{n}_{\alpha\beta}$ é o vetor normal à interface do fluido primário para o secundário (calculado usando o gradiente de fração de volume) e $\kappa_{\alpha\beta}$ é a curvatura da superfície, definida por:

$$\kappa_{\alpha\beta} = \nabla \cdot \vec{\hat{n}} \quad (3.23)$$

O vetor normal unitário à interface é calculado com base no gradiente da fração volumétrica normalizado:

$$\vec{\hat{n}}_{\alpha\beta} = \frac{\vec{n}_{\alpha\beta}}{|\vec{n}_{\alpha\beta}|} \equiv \frac{\nabla r_{\alpha}}{|\nabla r_{\alpha}|} \quad (3.24)$$

3.1.3 Metodologia de simulação de grandes escalas - LES

Segundo Murakami (1997), existem dois critérios básicos para a seleção e avaliação de modelos de turbulência: a precisão da previsão e tempo de CPU necessário. A fim de selecionar o modelo de turbulência a partir de vários modelos existentes, deve-se considerar o objetivo de cada aplicação e as vantagens de cada modelo. O esforço computacional relacionado ao uso da metodologia DNS é extremamente elevado, limitando o número de Re e Sc dos problemas analisados (Lombardi et al. (1996), Nagaosa (1999), Fulgosi et al. (2003), Banerjee (2006), Lin et al. (2008), Desoutter et al. (2009), Liu et al. (2009), Hassanvand e Hashemabadi (2011), Komori et al. (2012) e Takagaki et al. (2015)). Deste modo, trabalhos como o de Magnaudet e Calmet (2006) têm empregado LES para simular o problema visando alcançar valores de Re mais próximos às situações práticas. Entretanto, este estudo ainda é limitado, uma vez que está focado na simulação do escoamento apenas da fase líquida, assumindo que os mecanismos de transporte na fase gasosa não são limitantes do processo de transferência.

O objetivo da metodologia LES é o de simular o movimento de grande escala e modelar o movimento de pequena escala do fluxo turbulento. Deste modo, um filtro (no tempo e no espaço) é aplicado às equações de conservação, a fim de separar as grandes e pequenas escalas. A idéia desta metodologia é dividir as variáveis em filtrada e suas flutuações em torno deste valor filtrado. Na simulação das grandes escalas um filtro é aplicado para a separação das escalas que serão resolvidas diretamente (representada pela barra) das escalas de sub-malha que serão modeladas (representadas pela aspa).

Uma notação unidimensional, para a função filtro é mostrada a seguir. A operação de filtragem sobre uma função $f(\bar{x}, t)$, separadas em uma parte dita de grandes escalas $\bar{f}(\bar{x}, t)$ e outra dita sub-malha $f'(\bar{x}, t)$ definida no domínio D , é mostrada pela Equação (3.25):

$$f(\bar{x}, t) = \bar{f}(\bar{x}, t) + f'(\bar{x}, t) \quad (3.25)$$

A parte filtrada é dada por:

$$\bar{f}(\bar{x}, t) = \int_D f(\bar{x}, t) G(\bar{x} - \bar{x}') d\bar{x}' \quad (3.26)$$

onde a função filtro é definida de diversas formas, entre as quais, a mais comum é a função filtro por volume, dada pela equação:

$$G(\bar{x}) = \begin{cases} \prod_{i=1}^3 \frac{1}{\Delta^3} & \text{se } |\bar{x}_i| \leq \Delta/2 \\ 0 & \text{se } |\bar{x}_i| > \Delta/2 \end{cases} \quad (3.27)$$

onde Δ é o tamanho característico do filtro na direção x_i , o qual caracteriza a frequência de corte da filtragem.

Considerando a equação geral para o modelo multifásico, onde a propriedade instantânea, ϕ_α , é substituída por suas componentes $\bar{\phi}_\alpha$ e ϕ'_α tem-se a equação 3.28:

$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho_\alpha \bar{\phi}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_j} (r_\alpha \rho_\alpha \bar{u}_i \bar{\phi}_\alpha) = \frac{\partial}{\partial x_j} r_\alpha \left(\Gamma_\phi \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\phi}_\alpha - F_{ij} \right) \quad (3.28)$$

Nota-se na equação (3.28) a presença de um termo adicional F_{ij} que representa o fluxo da propriedade conservável ϕ_α , devido a flutuação que tem a seguinte forma:

- Para a equação de conservação da quantidade de movimento:

$$F_{ij} = \tau_{ij}^s = \rho_{mix} (\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (3.29)$$

- Para a equação de conservação da espécie química:

$$F_{ij} = q_{ij}^s = \rho_{mix} \left(\overline{y_{A\alpha} u_i} - \bar{y}_{A\alpha} \bar{u}_i \right) \quad (3.30)$$

onde τ_{ij}^s é o tensor de Reynolds de escala sub-malha e q_{ij}^s o fluxo de massa sub-malha.

Os modelos de turbulência são em geral classificados em dois grupos: aqueles que dependem da viscosidade turbulenta proposto por Boussinesq em 1877 (Pope, 2000) e aquelas que modelam diretamente as tensões turbulenta. Dando maior atenção ao primeiro grupo, os modelos de viscosidade turbulenta propõem expressar o tensor de Reynolds sub-malha em função da taxa de deformação gerada pelo campo de velocidade filtrado e da energia cinética turbulenta, da seguinte forma (da mesma forma pode-se proceder para o fluxo de sub-malha q_{ij}^s):

$$\tau_{ij}^s = -2\nu_{turb} \rho_{mix} \bar{S}_{ij} + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} = -\nu_{turb} \rho_{mix} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \kappa \delta_{ij} \quad (3.31)$$

$$q_{ij}^s = \rho_{mix} \frac{-\nu_{turb}}{Sc} \frac{\partial \bar{y}_\alpha}{\partial x_i} \quad (3.32)$$

onde a viscosidade turbulenta ν_{turb} pode ser calculada por diferentes modelos.

Muitos autores têm proposto diferentes modelagens para este termo. Eles são chamados de modelos de escala de sub-malha (SGS). O modelo mais conhecido é o proposto por Smagorinsky (1963).

Este modelo proposto por Smagorinsky (1963), baseia-se na hipótese de que a produção de tensões turbulentas sub-malha seja igual à dissipação ($P = \varepsilon$) onde a produção pode ser escrita em função da taxa de cisalhamento do campo filtrado e a dissipação pode ser escrita em função da escala de velocidade e do comprimento característicos sub-malha:

$$P = -\overline{u_i u_j} S_{ij} = 2\nu_{turb} \overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}} \quad \text{com} \quad \overline{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_i} \right) \quad (3.33)$$

$$\varepsilon = -C_s \left(\overline{u_i u_j} \right)^{3/2} / \Delta \quad (3.34)$$

Na última equação $\left(\overline{u_i u_j} \right)^{1/2}$ e Δ são as escalas de velocidade e de comprimento sub-malha, respectivamente.

Supõe-se ainda que a viscosidade turbulenta sub-malha seja proporcional a estas duas escalas, conforme a equação 3.35:

$$\nu_{turb} = (C_s \Delta)^2 \sqrt{2 \overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}}} \quad (3.35)$$

O comprimento característico Δ é calculado em função da malha de discretização. A constante de Smagorinsky, C_s , foi determinada analiticamente por alguns autores como Lilly (1967), para turbulência homogênea e isotrópica onde $C_s = 0,18$. No entanto o valor desta constante tem sido questionado e adaptado segundo o tipo de escoamento em análise. Apesar disto, este primeiro modelo sub-malha tem sido muito utilizado. No campo da modelagem sub-malha, avanços consideráveis têm sido conseguidos, chegando à novas concepções como os modelos dinâmicos que não necessitam do uso desta constante. Nesta nova concepção de modelagem, esta constante é substituída por uma função avaliada dinamicamente durante a simulação.

3.1.3.1 Modelagem dinâmica sub-malha

A modelagem sub-malha convencional envolve uma constante de proporcionalidade imposta (C_s). Uma das principais limitações diz respeito a análise de escoamentos em transição e nas proximidades de paredes, em consequência da imposição dessa constante. A determinação dinâmica de uma função de proporcionalidade no cálculo da viscosidade turbulenta pode representar avanços importantes.

Neste tipo de modelo, o coeficiente de proporcionalidade não é mais uma constante e sim uma função que se ajusta ao escoamento no tempo e no espaço. A base desta modelagem é o uso de dois filtros com comprimentos característicos diferentes: no primeiro, utiliza-se as dimensões da malha para calcular o seu comprimento característico e denomina-se filtro a nível da malha; no segundo utiliza-se um múltiplo das dimensões das malhas para calcular o comprimento característico, neste caso tem-se o filtro teste.

De acordo com Germano et al. (1991), é aplicado um filtro teste representado por til (\sim) nas equações filtradas, resultando no tensor de sub-teste. Assim, define-se o tensor das tensões relativas ao segundo filtro, também chamada de tensor sub-teste, como sendo:

$$T_{ij} = \overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j \quad (3.36)$$

Germano et al. (1991) mostrou que τ_{ij} e T_{ij} estão relacionados da seguinte forma:

$$L_{ij} = \overline{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j = T_{ij} - \tilde{\tau}_{ij} \quad (3.37)$$

A parte anisotrópica do tensor de Reynolds global sub-malha pode ser modelada como:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk} = -2C_v \bar{\Delta}^{-2} |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \quad (3.38)$$

e

$$T_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} T_{kk} = -2C_v \tilde{\Delta}^{-2} |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij} \quad (3.39)$$

onde,

$$\tilde{\tilde{S}}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.40)$$

$$|\tilde{\tilde{S}}| = \sqrt{2 \tilde{\tilde{S}}_{ij} \tilde{\tilde{S}}_{ij}} \quad (3.41)$$

$\bar{\Delta}$ é o comprimento característico do filtro associado a \bar{G} e $\tilde{\Delta}$ é o filtro associado a \tilde{G} . Assumindo que T_{ij} pode ser expresso em termos de $\tilde{\Delta}$ e \tilde{u}_i e τ_{ij} pode ser expresso em termos de $\bar{\Delta}$ e \bar{u}_i e substituindo as Equações 3.38 e 3.39 na Equação 3.37 e fazendo algumas manipulações chega-se a Equação 3.42 que permite determinar o coeficiente dinâmico (LILLY, 1992):

$$C_v = -\frac{1}{2} \frac{L_{ij} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \quad (3.42)$$

O tensor de Leonard, L_{ij} , já foi definido pela Equação 3.37 e o tensor M_{ij} é definido da seguinte forma:

$$M_{ij} = \tilde{\Delta}^2 \left| \tilde{S} \right| \tilde{S}_{ij} - \bar{\Delta}^2 \left| \bar{S} \right| \bar{S}_{ij} \quad (3.43)$$

Segundo Lilly (1992) e Calmet e Magnaudet (1997), o fluxo sub-malha para um escalar (como o fluxo de massa) é descrito como:

$$Q_{ij} = \widetilde{y_A u_j} - \tilde{y}_A \tilde{u}_j \quad (3.44)$$

assim, pode-se escrever:

$$L_{cj} = \widetilde{y_A \bar{u}_j} - \tilde{y}_A \tilde{u}_j = Q_j - \tilde{q}_j \quad (3.45)$$

resultando em,

$$C_c = -\frac{1}{2} \frac{L_{cj} M_{cj}}{M_{cj} M_{cj}} \quad (3.46)$$

onde,

$$M_{cj} = \tilde{\Delta}^2 \left| \tilde{S} \right| \frac{\partial \tilde{y}_A}{\partial x_j} - \bar{\Delta}^2 \left| \bar{S} \right| \frac{\partial \bar{y}_A}{\partial x_j} \quad (3.47)$$

O parâmetro ν_{turb} calcula-se como na Equação 3.35, porém com C_v ou C_c no lugar de C_s .

A dedução completa das Equações para a modelagem LES podem ser vista nos estudos de Lilly (1992) e Germano et al. (1991).

3.2 DESCRIÇÃO DAS CONFIGURAÇÕES UTILIZADAS NAS SIMULAÇÕES DE INTERESSE

Esta seção está dividida em três partes principais, descrevendo as configurações dos casos selecionados para validação e avaliação dos parâmetros de interesse, o domínio computacional e a malha de discretização empregados em cada caso simulado nesse estudo.

3.2.1. Configurações dos casos selecionados para validação e avaliação dos parâmetros de interesse

A Tabela 3.1 traz as principais configurações utilizadas para as simulações. As dimensões dos domínios em cada simulação e malhas empregadas serão discutidas nas Seções 3.3.2 e 3.3.3. A simulação chamada "Validação" refere-se a validação do presente estudo a partir da simulação de Komori et al. (2010). Os Casos 1, 2 e 3 são simulações com diferentes velocidades de fricção na fase gasosa, por consequência, diferentes números de Reynolds baseados na velocidade de fricção, a fim de verificar a influência deste parâmetro na configuração da interface, da turbulência próxima à interface e na transferência de massa de um composto através da interface líquido-gás. Nestes casos a transferência de massa de um composto é da fase líquida para a fase gasosa. Os Casos 1, 4 e 5 servirão para avaliar a influência da constante de Henry na transferência de massa de um composto. Para isso foram escolhidos compostos odorantes com resistência à transferência de massa na fase líquida, representada pelo sulfeto de hidrogênio, com constante de Henry igual a 8×10^{-1} . O segundo composto escolhido é a amônia que possui resistência em ambas as fases, com constante de Henry igual a 5×10^{-4} e o terceiro composto escolhido foi o ácido valérico, que possui resistência a transferência na fase gasosa e a constante de Henry igual a 2×10^{-5} . Estes

compostos odorantes foram escolhidos por estarem presentes em estações de tratamento de esgotos (STUETZ e FRECHEN, 2001).

Tabela 3.1 - Configurações das simulações de interesse.

Simulação	Fase Gasosa				Fase Líquida			Interface	Passo de tempo (s)
	$u_{*,g}$ (m/s)	$Re_{*,g}$	Sc	Domínio (x_1, x_2, x_3)	$u_{*,l}$ (m/s)	Sc	Domínio (x_1, x_2, x_3)	K_H	-
Komori et al. (2010)	0,25	210	1	8h;h;4h	0,0081	1	8h;2h;4h	1,1	-
Validação	0,25	210	1	8h;h;4h	0,0081	1	8h;2h;4h	1,1	0,0003
Caso 1	0,25	210	1	8h;h;4h	0,0081	1	8h;2h;4h	8×10^{-1}	0,0003
Caso 2	0,1	86	1	16h;h;8h	0,0033	1	16h;2h;8h	8×10^{-1}	0,001
Caso 3	0,05	43	1	24h;h;12h	0,0017	1	24h;2h;12h	8×10^{-1}	0,002
Caso 4	0,25	210	1	8h;h;4h	0,0081	1	8h;2h;4h	5×10^{-4}	0,0003
Caso 5	0,25	210	1	8h;h;4h	0,0081	1	8h;2h;4h	2×10^{-5}	0,0003

3.2.2 Domínio computacional

A modelagem de escoamentos multifásicos com baixos números de Reynolds exige um estudo da adequação da geometria para que as grandes escalas turbulentas sejam modeladas. A influência da condição de contorno periódica é pequena desde que as dimensões longitudinais e transversais sejam suficientemente grandes em comparação com as escalas do escoamento (POPE, 2000).

Muitos estudos de simulação numérica de tanque ou canal (MOIN e KIM, 1982; KIM et al., 1987, LOMBARDI et al., 1996, DE ANGELIS et al., 1997, MOSER, 1999, FULGOSI et al., 2003) utilizam em suas simulações uma configuração de tamanho de domínio já consolidado na literatura por um estudo experimental de Comte-Bellot (1963) *apud* MOIN e KIM, 1982 e um número de Reynolds baseado na velocidade de fricção e metade da altura do tanque em torno de 180. Nestes trabalhos, inicialmente selecionou-se o comprimento, nas direções longitudinal (x) e transversal (z), através das medidas das correlações de dois pontos. A análise mostra que a correlação entre flutuações de velocidade, para dois pontos afastados da

parede, tornam-se insignificantes, quando a separação dos pontos é da ordem de $3,2h$ para a direção x e de $1,6h$ para a direção z , sendo h é a altura do domínio computacional. Assim, na direção homogênea, onde condições de contorno periódicas são normalmente impostas, as correlações de dois pontos da solução devem decair para aproximadamente zero, dentro de metade do domínio, para garantir a correta representação estatística das grandes escalas (KIM et al., 1987, FROHLICH, et. al, 2005, TSUKAHARA et. al, 2006). Dessa forma, nas direções longitudinal e transversal do escoamento, o domínio computacional deve ser aproximadamente duas vezes esta dimensão (MOIN e KIM, 1982).

Mais recentemente, alguns estudos realizaram simulações testando domínios de tamanhos variados para verificar qual o tamanho de domínio mínimo suficiente para um determinado número de Reynolds e assim diminuir o custo computacional (TSUKAHARA et al., 2006, HWANG e COSSU, 2011, HWANG, 2013, DURÁN e JIMENEZ, 2014) ou realizaram a simulação com uma geometria escolhida e verificam se ela é suficientemente grande para que a correlação de dois pontos tenda a zero no centro do domínio (VIAZZO et. al., 2001, FRÖHLICH et al., 2005).

Para o estudo de Iida e Nagano (1998), verificou-se que um domínio adequado para Reynolds igual a 60 era o que apresentava tamanho igual a 1,25 vezes maior do que o utilizado para Reynolds igual a 100. Ainda mais restritivos que os primeiros autores, os estudos de Tsukahara et al. (2004) e Tsukahara et al. (2014) utilizaram uma extensão do domínio computacional duas vezes maior para um Reynolds duas vezes menor. Portanto, quando o número de Reynolds se aproximou de 80 a geometria dobrou de tamanho quando comparado ao Reynolds de 180 e assim permaneceu até o Reynolds de 60. Percebe-se que a proporção utilizada para a geometria no estudo de Iida e Nagano (1998) para Reynolds igual a 100 foi a mesma utilizada no estudo de Tsukahara et al. (2004) e Tsukahara et al. (2014) para Reynolds igual a 180. Os estudos de Tsukahara et al. (2004) e Tsukahara et al. (2014) verificaram a boa adequação da geometria considerando a correlação de dois pontos. Abe et al. (2001) realizaram simulações com Reynolds variando de 180, 395 e 640. Na simulação de 180 o domínio computacional foi o dobro do de 395 e os domínios também foram verificados pela correlação de dois pontos.

Moin et al. (1982) calculam a correlação entre 2 pontos para direção longitudinal (que também pode ser adaptada para direção transversal) como:

$$R_{11}(y, d_1) = \frac{\overline{u_1'(x, y, z)u_1'(x + d_1, y, z)}}{u_1'^2(x, y, z)} \quad (3.48)$$

onde uma média no tempo é realizada e d_1 é o comprimento da metade do domínio. Equação similar foi utilizada no estudo de De Angelis et al. (1997) e Fröhlich et al. (2005).

No presente trabalho, o domínio que serviu de referência para este estudo é o utilizado por Komori et al. (2010) e a partir deste estimou-se as configurações dos demais domínios. Na ausência de pesquisas que simulem números de Reynolds exatamente como os do presente estudo, o trabalho atual apóia-se na relação entre o número de Reynolds e o tamanho do domínio computacional adotados nos estudos de Abe et al. (2001), Tsukahara et al. (2004) e Tsukahara et al. (2014), por mostrar intervalos de números de Reynolds similares com os números de Reynolds estudados no presente trabalho. Dessa forma, optou-se por considerar inicialmente a geometria de referência do estudo de Komori et al. (2010) para a simulação com Re igual a 210 (Caso base e Validação) e dobrar as dimensões longitudinal e transversal para os casos com Re igual a 86 e triplicar as dimensões para os casos com Re igual a 43. Após a utilização inicial destas geometrias propostas, foram efetuadas análises de correlação entre dois pontos para direções longitudinal e transversal para verificar a análise de adequação do domínio computacional.

Os pontos selecionados para análise estão localizados na região central de cada subdomínio, líquido e gasoso para a coordenada y , como feito nos estudos de Kim et al. (1987), Moin et al. (1987), Viazzo et al. (2001) e Fröhlich et al. 2005. A Tabela 3.2 apresenta as coordenadas dos pontos utilizados para correlação de dois pontos. Para a análise de R_{uu} e R_{ww} considerou-se a componente z e a componente x , respectivamente, estando no centro do domínio de interesse.

A Figura 3.2 mostra os resultados da correlação de dois pontos. As curvas de correlação indica a dependência de um ponto do domínio em relação a um outro ponto distante. O comportamento das curvas se assemelha muito ao desejado, como mostrado em Townsend (1999), onde R_{uu} decai suavemente até atingir correlação zero e R_{ww} mostra alguns picos de variação de correlação até chegar a zero. Valores de correlação negativa correspondem aos locais em uma vizinhança onde a velocidade vertical tem sinais opostos e a presença da

captura de grandes estruturas turbulentas. O gráfico de correlação mostra mais picos para o Caso 1, podendo ser devido a maior presença de vórtices na direção transversal ao escoamento (HENN e SYKES, 1999).

Tabela 3.2 - Coordenadas dos pontos utilizados para correlação de dois pontos.

Fase	Simulação	Coordenada (y,z) análise R_{uu}	Coordenada (x,y) análise R_{ww}
Gasosa	Caso 1	G1(0,5h; 2h)	G4(4h; 0,5h)
	Caso 2	G2(0,5h; 4h)	G5(8h; 0,5h)
	Caso 3	G3(0,5h; 6h)	G6(12h; 0,5h)
Líquida	Caso 1	L1(1h; 2h)	L4(4h; 1h)
	Caso 2	L2(1h; 4h)	L5(8h; 1h)
	Caso 3	L3(1h; 6h)	L6(12h; 1h)

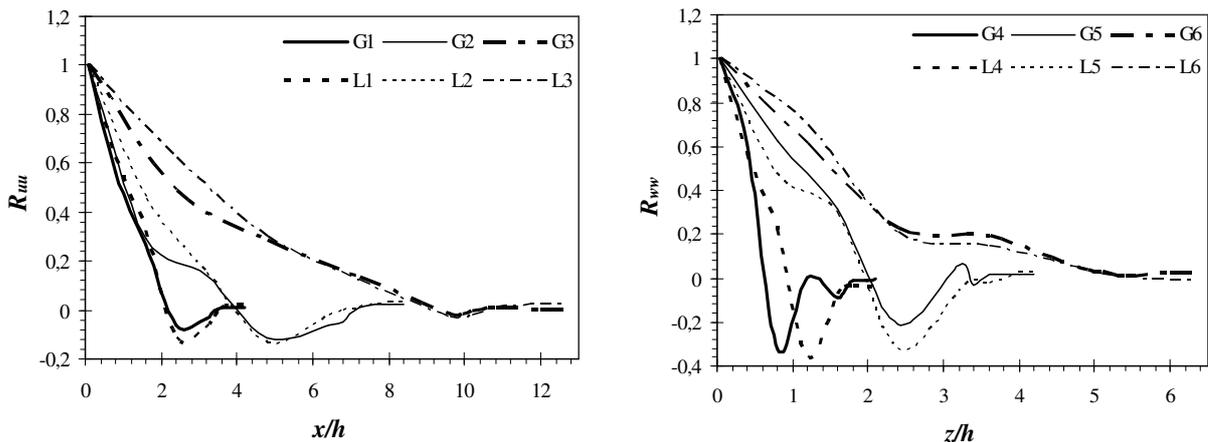


Figura 3.2 - Correlação de dois pontos nas direções longitudinal R_{uu} e transversal R_{ww} ao escoamento.

Para a altura do domínio computacional, Pope (2000) e Komori et al. (2012) afirmam que um domínio computacional adequado deve permitir que metade da amplitude de onda represente menos de um quarto da altura do domínio. Caso estes limites sejam respeitados, considera-se que os limites inferior e superior do domínio possuirão pouca influência no desenvolvimento das ondas. Neste contexto a altura h selecionada é a mesma empregada por Komori et al. (2012), que representa o caso de maior amplitude das ondas.

3.2.3 Malha computacional

A malha de discretização utilizada no presente estudo está mostrada na Figura 3.3. As malhas hexaédricas, estruturadas, com camada de refino próximo à interface foram geradas no *software* ICEM 14.5.

Os casos de Validação, Caso 1, 4 e 5, consideram uma malha de (155,50,60) e (155,85,60) volumes de controle nas direções (x,y,z) , para a fase gasosa e líquida, respectivamente. O primeiro ponto nodal foi considerado estando em Δy^+ (adimensionalizado pela velocidade de fricção e viscosidade do fluido) igual a 0,13 e 0,06 para o lado gasoso e líquido, respectivamente, como mencionado no estudo de Komori et al. (2010). Esta distância do primeiro ponto nodal a interface, coincide com o valor proposto por Magnaudet e Calmet (2006) que deve existir no mínimo três pontos nodais dentro da camada difusiva de concentração que é dada por $hSc^{-1/2} Re^{-3/4}$. A região refinada próximo à interface mantém o comprimento dos volumes de controle constantes até uma altura suficiente para cobrir toda a amplitude máxima esperada das ondas formadas, garantindo que ao longo de toda interface exista no mínimo três pontos nodais dentro da camada difusiva de concentração.

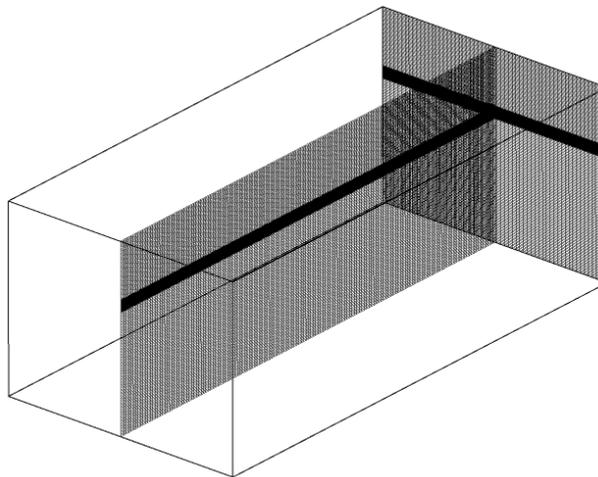


Figura 3.3 - Domínio e malha computacional utilizados no presente estudo.

Nas demais simulações, as escalas das dimensões dos volumes de controle foram feitas com base na proporcionalidade entre o tamanho das escalas de Kolmogorov e o número de Reynolds do escoamento, ou seja, as dimensões dos volumes de controle foram escaladas na proporção de $Re^{-3/4}$ em relação ao caso base. Feita esta análise, percebeu-se que os números

de volumes de controle em cada direção permaneceram praticamente constantes para os três casos, sofrendo alteração somente no tamanho.

3.2.4 Adimensionalização das variáveis de interesse

Para especificar as condições de contorno do problema e para a análise dos resultados de cada fase (líquida ou gasosa) as variáveis de interesse estão adimensionalizadas a partir das seguintes variáveis: velocidade de fricção (u_*), viscosidade cinemática do fluido (ν), concentração inicial do tanque ($C_{Al,0}$ ou $C_{Ag,0}$). Todas as variáveis adimensionalizadas possuem um sobrescrito + para identificá-las.

A velocidade de fricção de cada fase é escrita como:

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \quad (3.49)$$

onde τ é a tensão de cisalhamento na interface líquido-gás e ρ é a massa específica do fluido.

Assim as variáveis adimensionalizadas ficam como:

- Velocidade adimensional na direção do escoamento:

$$U^+ = \frac{u}{u_*} \quad (3.50)$$

- y é a distância vertical a partir da interface:

$$y^+ = \frac{yu_*}{\nu} \quad (3.51)$$

- Tempo adimensional relacionado ao escoamento e tempo adimensional relacionado a concentração:

$$t^+ = \frac{tu_*}{h} \quad (3.52a)$$

$$t_s^+ = \frac{t_s u_*}{h} \quad (3.52b)$$

- Intensidade da turbulência dada pelo valor quadrático médio, RMS (do inglês, *root mean square*), relacionada a flutuação de velocidade $u'_{rms} = \sqrt{u'^2}$:

$$u'^+_{rms} = \frac{u'_{rms}}{u_*} \quad (3.53)$$

- Concentração adimensional:

$$C_g^+ = \frac{C_{Ag}}{C_{Ag,0}} \quad (3.54a)$$

$$\text{ou} \quad C_l^+ = \frac{C_l}{C_{Al,0}} \quad (3.54b)$$

-Fluxo adimensional:

$$J_{Ag}^+ = \frac{J_{Ag} u_*}{C_{Ag,0}} \quad (3.55a)$$

$$\text{ou} \quad J_{Al}^+ = \frac{J_{Al} u_*}{C_{Al,0}} \quad (3.55b)$$

3.2.5 Condições de contorno e condições iniciais

As condições de contorno utilizadas baseiam-se naquelas encontradas em estudos analisados na revisão bibliográfica e para descrevê-las a Figura 3.1 mostrada no início desta seção deve ser considerada.

As fronteiras superior (ar) e inferior (água) do domínio (planos xz) são consideradas condição de parede com deslizamento livre com um gradiente de concentração nulo. Condições de contorno periódicas são impostas nas seções de entrada e saída do domínio de estudo, direção longitudinal, (direção de x) e na direção transversal (direção de z). Este tipo de condição de contorno é útil quando a geometria envolve repetições. Na direção longitudinal, é imposto

para a fase gasosa um gradiente de pressão $\left(\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{-u_{*,g}^2 \rho_g}{h} \right)$.

No instante inicial, as concentrações da espécie química na fase gasosa ($C_{Ag,0}$) e na fase líquida ($C_{Al,0}$) são consideradas uniformes em todas as configurações estudadas e um perfil de velocidade do vento, na direção longitudinal do tanque, é considerado. O perfil turbulento bem desenvolvido próximo a parede está mostrado na Figura 3.4, onde U^+ é a velocidade longitudinal adimensional e y^+ é a distância vertical a parede:

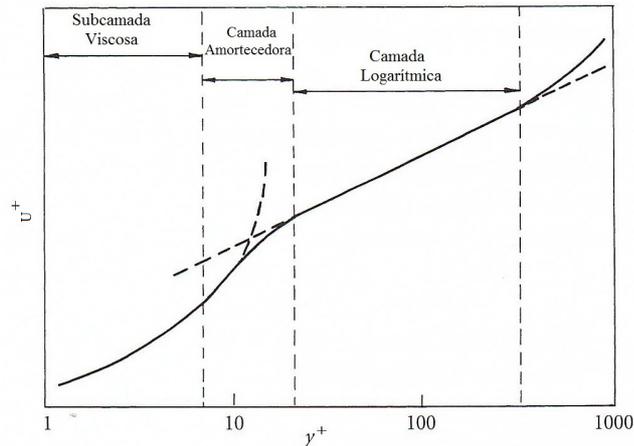


Figura 3.4 - Configuração do perfil vertical de velocidade próximo a parede.

Fonte: Adaptado de DAVIDSON, 2009.

Segundo Çengel e Cimbala (2007) e Davidson (2009) o escoamento turbulento ao longo da parede pode ser dividido nas seguintes regiões:

- A camada muito fina próxima a parede na qual os efeitos viscosos são dominantes é a subcamada viscosa e está localizada em $y^+ < 5$. O perfil de velocidade nesta camada é dado por:

$$u^+ = y^+ \quad (3.56)$$

- Para $y^+ > 30$, tem-se a camada logarítmica, na qual os efeitos turbulentos são mais significativos. O perfil logarítmico nesta região é dado por:

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln(y^+) + B \quad (3.57)$$

- Entre as duas camadas anteriores está a camada amortecedora, localizada entre $5 < y^+ < 30$. Nesta camada os efeitos turbulentos se tornam significativos, mas o escoamento ainda é

dominado pelos efeitos viscosos. Não existe um perfil de velocidade preciso para esta região (ÇENGEL e CIMBALA, 2007). A partir da Figura 3.4 e com base nos perfis linear e logarítmico, verifica-se que as curvas se interceptam em $y^+ \approx 11$, assim, antes de $y^+ \approx 11$ adota-se o perfil linear e após este valor, adota-se o perfil logarítmico.

Nas equações anteriores,

$$y^+ = \frac{yu_*}{\nu} \quad (3.58 \text{ a}) \quad u^+ = \frac{u}{u_*} \quad (3.58b)$$

k é a constante *de Von Karman* adotada igual a 0,4;

u_x é a velocidade na direção longitudinal;

u_* é a velocidade de fricção;

B é uma constante em torno de 5,5.

3.3 MÉTODO NUMÉRICO

Após a modelagem matemática do problema em estudo o próximo passo é a escolha de um método de discretização das equações governantes. Quando se opta por um método numérico espera-se resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes na equação por expressões algébricas que envolvem a função incógnita (MALISKA, 2004).

A discretização e solução das equações governantes neste trabalho são efetuadas por meio do método dos Volumes Finitos baseados em Elementos (EbFVM) (MALISKA, 2004), utilizando o *software* ANSYS-CFX 14.5.

Na metodologia EbFVM os volumes de controle são construídos em torno dos vértices dos elementos, originando uma metodologia centrada nos vértices da malha. Nesta construção, cada elemento é dividido em sub-elementos ligando-se o centróide geométrico de cada elemento com o segmento médio de cada elemento. O volume de controle (VC) resultante é formado pelas porções de elementos vizinhos, como mostrado na Figura 3.5. O processo de obtenção das equações aproximadas é o processo de discretização. O domínio é discretizado em um conjunto de volumes de controle não sobrepostos, que podem ser irregulares no

tamanho e na forma. No centróide de cada VC localiza-se um nó computacional, no qual são calculados os valores das variáveis.

Para a integração das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e espécie química, sobre um volume de controle, aplica-se o Teorema de Divergência de Gauss. A aplicação deste teorema possibilita a conversão de integrais de volume em integrais de superfície, sendo as integrais de superfície correspondentes aos fluxos que cruzam as superfícies do volume de controle e as integrais de volume correspondentes aos termos de fonte ou acumulação.

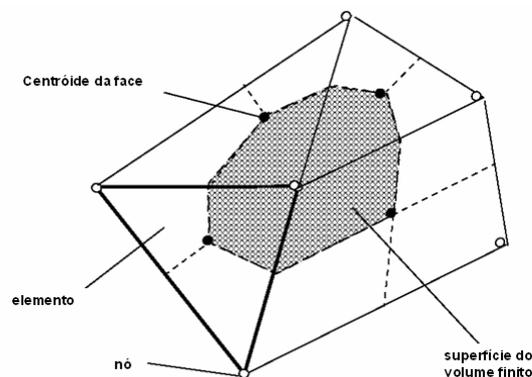


Figura 3.5- Superfície de um volume de controle.

Fonte: Adaptado do Manual ANSYS-CFX 14.5.

Para avaliar o fluxo convectivo nas faces dos volumes de controle o esquema de interpolação escolhido para a simulação LES é o esquema de diferenças centrais para todas as equações. Para a discretização temporal foi utilizado o esquema de segunda ordem *backward* Euler.

O *software* ANSYS-CFX 14.5 usa um acoplamento de pressão-velocidade baseado no esquema de interpolação Rhie-Chow (Rhie & Chow (1983)) modificado para a solução do sistema de equações em um único nó do elemento da malha numérica.

O conjunto de equações lineares que surgem após a aplicação do EbFVM, para todos os volumes de controle do domínio, são equações de conservação (massa, quantidade de movimento e espécie química) na forma discreta. Depois que todo o domínio estiver discretizado tem-se um conjunto de equações algébricas, ou seja, uma equação algébrica para cada volume de controle ou ponto nodal. O método numérico utilizado pelo ANSYS-CFX

14.5 para resolver o sistema de equações algébricas gerado é o *Algebraic Multigrid (AMG)* baseado no método das correções aditivas acelerado por uma fatoração incompleta (*Incomplete Lower Upper*) com *Multigrid accelerated (MG)*.

O critério de convergência adotado para cada variável resolvida foi NRMS (*Normalized Root Mean Square*) menor que 10^{-5} .

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

O transporte da quantidade de movimento e massa de um composto, em um sistema multifásico líquido-gás multicomponente, é o principal objetivo deste estudo e os resultados das simulações numéricas serão mostrados neste capítulo. A motivação dessas simulações consiste em avaliar parâmetros como: número de Reynolds, número de Schmidt e a constante de Henry influenciando no escoamento e na taxa de transferência de massa de um composto.

Para melhor visualização dos resultados obtidos, este capítulo está dividido em seis partes: A Seção 4.1 trata da validação do modelo proposto neste trabalho, através da comparação com os resultados de Komori et al. (2010). A Seção 4.2 traz uma análise da interface líquido-gás a partir dos diferentes números de Reynolds avaliados. As Seções 4.3 e 4.4 trazem uma análise do escoamento e turbulência na fase gasosa e na fase líquida, respectivamente. Na Seção 4.5 é mostrada a influência do número de Reynolds na transferência de massa enquanto a influência da constante de Henry é vista na Seção 4.6. Todas as configurações das simulações podem ser encontradas na Tabela 3.1.

4.1 VALIDAÇÃO DO MODELO PROPOSTO

A Figura 4.1 mostra a configuração instantânea da interface líquido-gás no instante de tempo adimensional t^+ igual a 130 para: (a) o estudo de Komori et al. (2010) e (b) o presente estudo. O valor da variação vertical da altura da interface está adimensionalizado pela altura do tanque na fase gasosa. A cor mais clara corresponde a crista e a cor escura ao vale da onda. As ondas mostram-se não uniformes e é possível verificar o aparecimento de pequenas ondulações (ondas capilares ou *ripples*) entre a crista e o vale da onda na direção longitudinal do escoamento. As duas simulações mostraram igual frequência de onda no mesmo tempo de análise.

A Figura 4.2 mostra a variação vertical da altura da interface dada pela diferença entre a crista mais alta e o vale mais baixo da onda (H_s) adimensionalizada pelo valor da altura do tanque na fase gasosa. É possível notar na Figura 4.2 que a simulação do presente estudo acompanha satisfatoriamente o comportamento da evolução temporal da altura da interface mostrada no

estudo de Komori et al. (2010). A altura aumenta conforme o tempo evolui e para todos os tempos a ordem de grandeza da variável é a mesma para ambos os estudos. O estudo de Komori et al. (2010) mostra a evolução temporal da variação vertical da altura da interface até o tempo adimensional de 150. A fim de verificar se a altura iria se estabilizar, o presente estudo prolongou o tempo de simulação e verificou que a altura segue para uma estabilidade a partir de t^+ aproximadamente igual a 160.

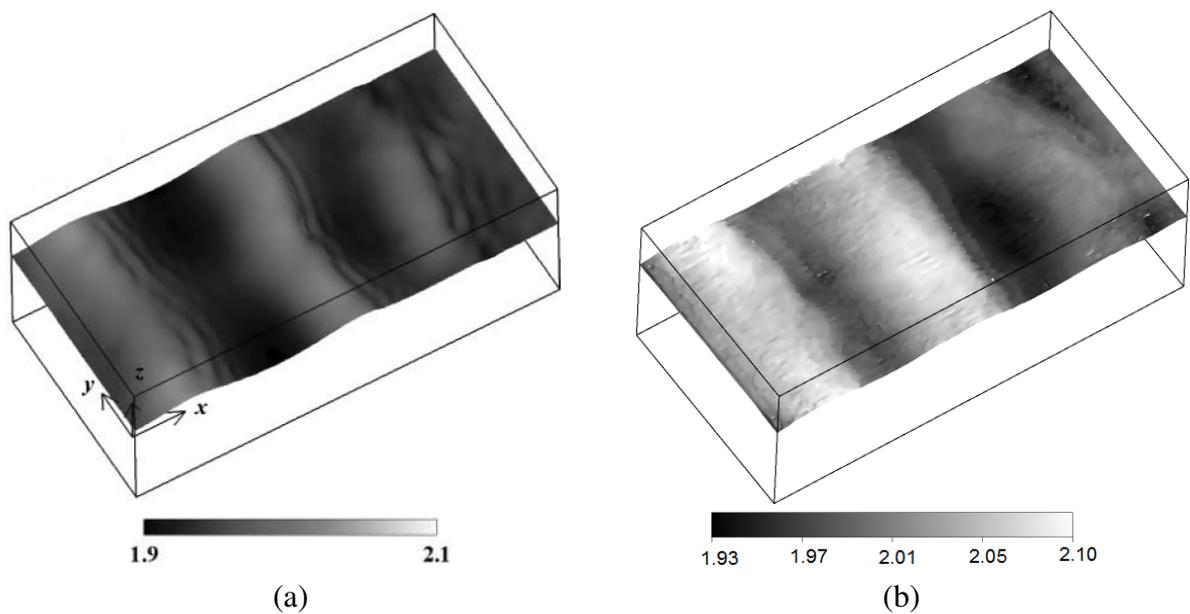


Figura 4.1- Configuração instantânea da interface líquido-gás para o tempo adimensional de 130 para: (a) Komori et al. (2010) e (b) presente estudo.

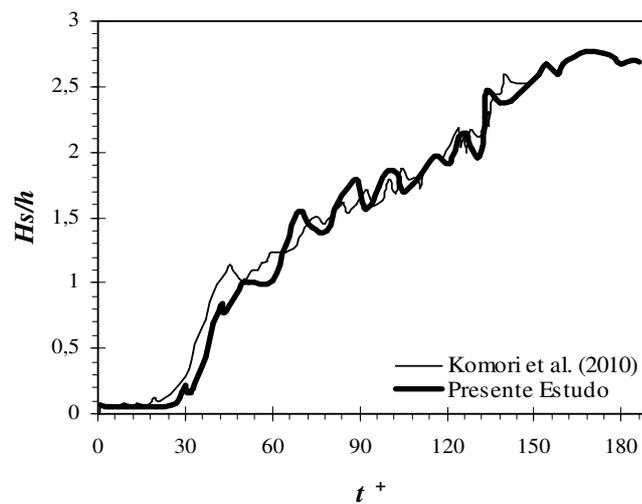


Figura 4.2- Evolução temporal da variação vertical da altura da interface líquido-gás para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

A Figura 4.3 mostra a evolução temporal da velocidade média na interface líquido-gás ($U_{interface}$). A velocidade média na interface cresce até cerca de t^+ igual a 40 e decresce até 80. A partir de 80 a velocidade permanece constante. Uma discussão mais detalhada sobre este comportamento da velocidade na interface com ondas é mostrada nas seções seguintes. O perfil simulado neste estudo possui um desvio de 4% no pico e de 10% no tempo final em relação aos resultados de DNS de Komori et al. (2010).

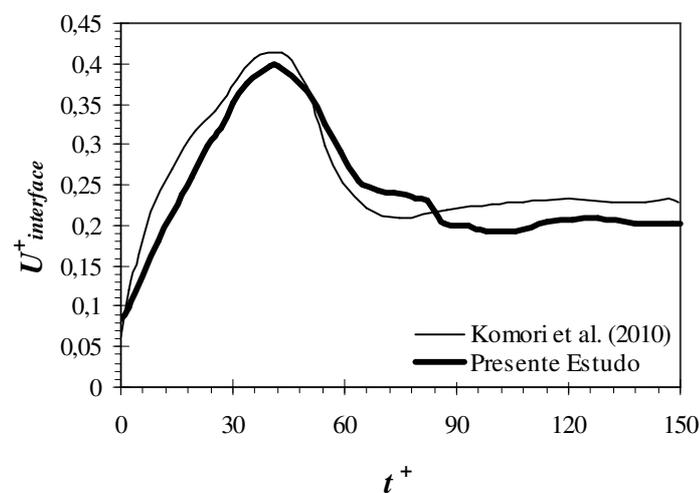


Figura 4.3 - Evolução temporal do perfil de velocidade média na interface líquido-gás para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

Assim como feito no estudo de Komori et al. (2010), os resultados utilizados para a análise estatística do modelo foram gerados a partir de uma média no tempo no intervalo de tempo de simulação de 130 a 150, momento em que o escoamento já estava bastante desenvolvido. A Figura 4.4 mostra o perfil vertical de velocidade média na direção do escoamento na fase gasosa. As variáveis estão adimensionalizadas pela velocidade de fricção e pela viscosidade cinemática do fluido. Percebe-se que o perfil simulado neste trabalho possui boa concordância com o perfil estimado no estudo de Komori et al. (2010) analisando os extremos e a parte central do perfil. As maiores discrepâncias são encontradas próximas a interface, uma vez que na presença de ondas é necessário escolher uma altura média que represente a interface e esta altura da interface passa a servir de referência. Em regiões muito próximas a interface, mas não exatamente sobre a interface, local de grande variação hidrodinâmica, esta aproximação pode acarretar alguns desvios entre as duas simulações.

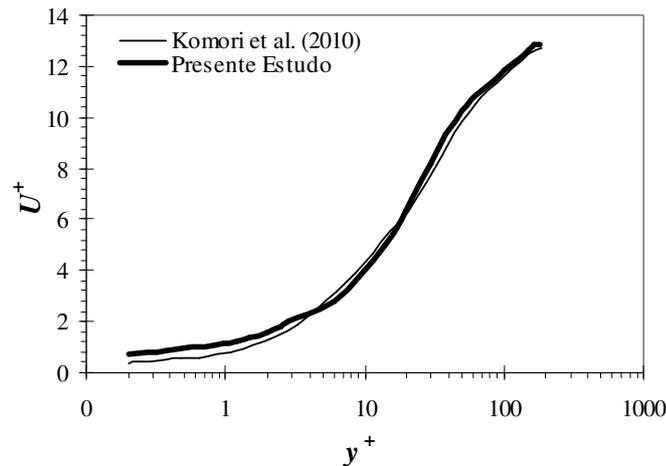


Figura 4.4- Perfil vertical de velocidade média na direção longitudinal na fase gasosa para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

A Figura 4.5 mostra a distribuição vertical da intensidade da turbulência nas três direções do escoamento, adimensionalizadas pela velocidade de fricção, $u'_{rms}{}^+$, $v'_{rms}{}^+$, $w'_{rms}{}^+$. O valor máximo da flutuação de velocidade para as três componentes ocorre em $y^+ \approx 20$. A Tabela 4.1, mostra os valores máximos das flutuações e as diferenças encontradas entre os resultados de Komori et a. (2010) e o presente estudo.

A Figura 4.6 mostra o perfil vertical de velocidade média na direção do escoamento para a fase líquida. Assim como foi feito para a fase gasosa, também para a fase líquida, as variáveis estão adimensionalizadas pela velocidade de fricção e pela viscosidade cinemática do fluido. Pelo perfil, é possível perceber que a maior discrepância entre as simulações está na região próxima a interface, sendo o perfil bastante semelhante na região mais afastada. Assim, considerando o pior cenário, na região próxima a interface o erro entre os dois modelos é cerca de 13%.

Tabela 4.1 - Comparação entre o valor máximo do RMS da flutuação de velocidade adimensionalizada, para a fase gasosa para as três componentes de velocidade.

	Komori et al. (2010)	Presente estudo	Erro percentual
$u'_{rms}{}^+$	3,3	3,16	4,2%
$v'_{rms}{}^+$	1,0	0,96	4%
$w'_{rms}{}^+$	1,23	1,22	0,8%

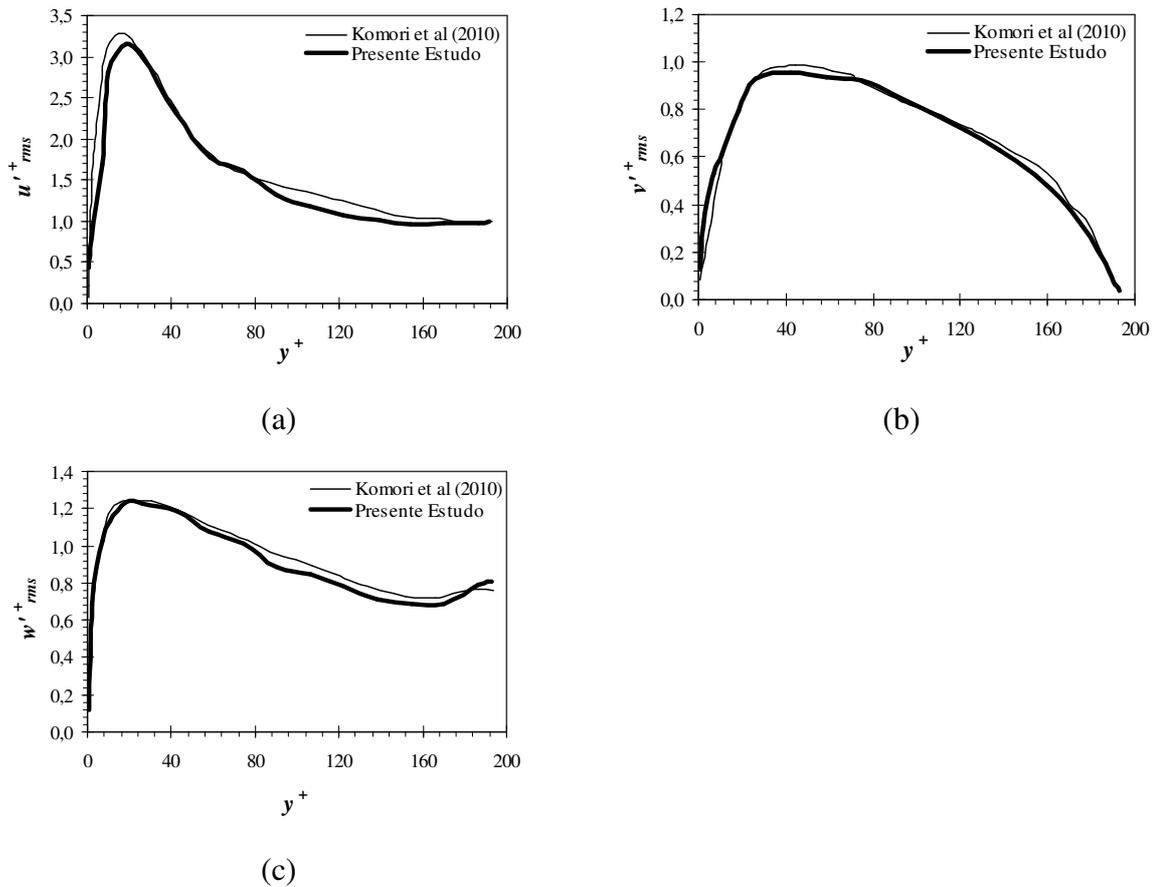


Figura 4.5 - Comparação da distribuição da intensidade da turbulência vertical das flutuações de velocidade na fase gasosa para as componentes: (a) u'_{rms} , (b) v'_{rms} e (c) w'_{rms} entre o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

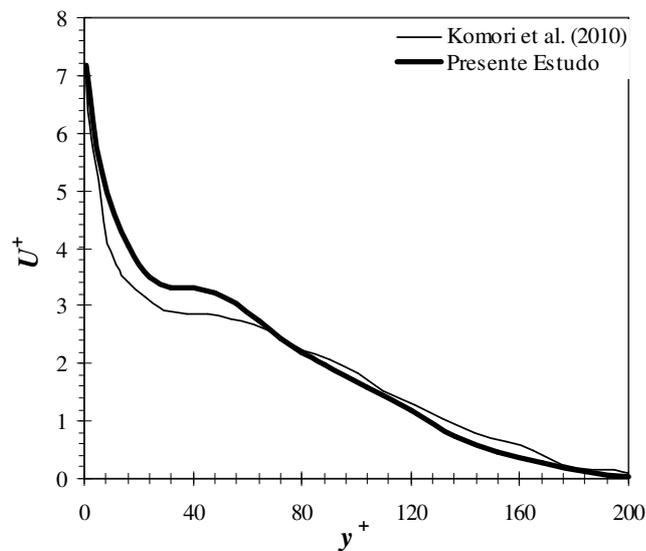


Figura 4.6- Perfil vertical de velocidade média na direção longitudinal na fase líquida para o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

A Figura 4.7 mostra a distribuição vertical da intensidade da turbulência nas três direções do escoamento adimensionalizadas pela velocidade de fricção, $u'_{rms}{}^+$, $v'_{rms}{}^+$, $w'_{rms}{}^+$. O comportamento dos perfis de flutuação de velocidade são similares para as três componentes da velocidade. A Tabela 4.2, mostra os valores máximos das flutuações e as diferenças encontradas entre os resultados de Komori et al. (2010) e o presente estudo para a fase líquida. Assim como visto para a fase gasosa, também na fase líquida, os perfis mostram boa concordância entre os modelos com valores máximos das variáveis com mesma ordem de grandeza e localização vertical.

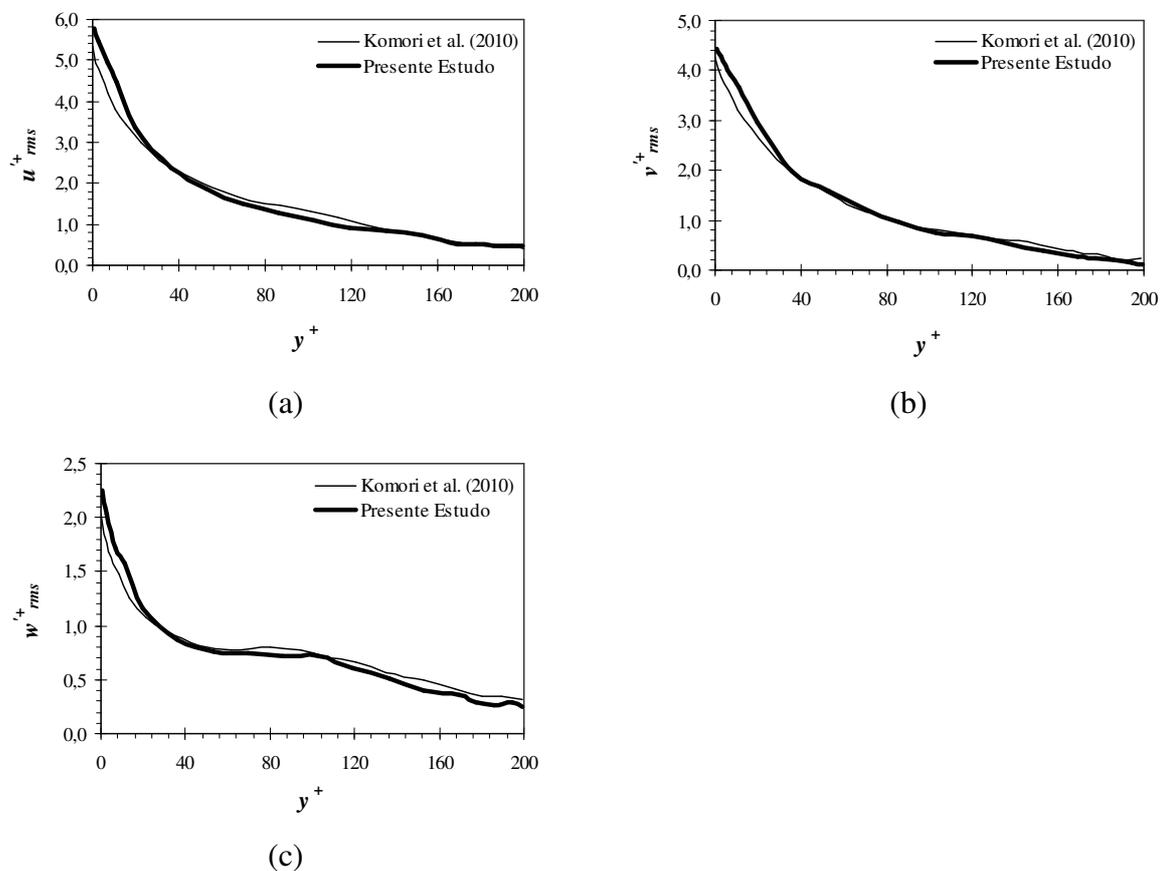


Figura 4.7- Comparação da distribuição da intensidade da turbulência vertical das flutuações de velocidade na fase líquida para as componentes: (a) $u'_{rms}{}^+$, (b) $v'_{rms}{}^+$ e (c) $w'_{rms}{}^+$ entre o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

Tabela 4.2 - Comparação entre o valor máximo do RMS da flutuação de velocidade adimensionalizada, para a fase líquida para as três componentes de velocidade.

	Komori et al. (2010)	Presente estudo	Erro percentual
u'_{rms}	5,7	5,4	5,2%
v'_{rms}	4,3	4,4	2,3%
w'_{rms}	2,1	2,2	4,5%

O fluxo de massa da fase líquida (J_{Al}) é utilizado para o cálculo de k_l , como proposto no estudo de Komori et al. (2010). Nesta fase de validação, a transferência do composto, acontece da fase gasosa para a fase líquida. Assim, o coeficiente de transferência de massa da fase líquida é dado pela Equação (4.1):

$$k_l = \frac{J_{Al}}{\Delta C} \quad (4.1)$$

onde ΔC é a diferença entre a concentração do composto A na interface, C_{Ali} , e a concentração no seio da fase líquida, C_{Alb} . Para o caso de validação, assim como no estudo de Komori et al. (2010), C_{Alb} foi considerada igual a zero. O fluxo é dado por:

$$J_{Al} = \frac{1}{A_i} \int_{interface} (D_A + D_t) \frac{\partial C}{\partial n} dS \quad (4.2)$$

onde n é a direção normal com a interface líquido-gás. A_i é a área da interface. D_A é o coeficiente de difusão molecular do composto A na fase líquida. D_t é o coeficiente de difusão turbulento, muito pequeno próximo a interface em comparação com D_A , já que o fenômeno de transferência de massa é governado pela sub-camada laminar de concentração.

A análise da transferência de massa é realizada no tempo t_s^+ que é o tempo adimensional relacionado a transferência de massa do composto, iniciada no tempo adimensional de escoamento de 47. Em $t^+ = 47$, as ondas na superfície líquido-gás já estão bem desenvolvidas (Komori et al., 2010) e assim, tem-se que $t_s^+ = t^+ - 47$.

A Figura 4.8 mostra a variação do coeficiente de transferência de massa da fase líquida com o tempo. O resultado mostra que o presente estudo subestimou os valores de k_l instantâneo a partir de $t_s^+ \approx 6$ e apresentou um erro máximo em torno de 15% para t_s^+ igual a aproximadamente 30 e um erro final em torno de 7%. De forma geral, a série temporal mostra boa concordância entre os dois estudos com tendência semelhante. Boa concordância também é notada nas regiões em que a curva muda de inclinação acentuada em $t_s^+ \approx 6$ para uma curvatura mais suave em $t_s^+ \approx 20$.

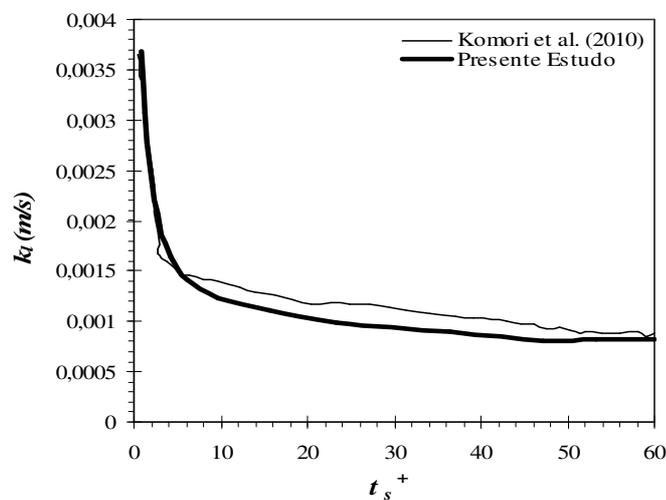


Figura 4.8- Comparação da evolução temporal do coeficiente de transferência de massa do composto na fase líquida entre o estudo de Komori et al. (2010) e o presente estudo.

Para verificar o comportamento do perfil de concentração na presença de vórtices longitudinais e transversais próximos à interface líquido-gás, foi gerada a Figura 4.9, (a) para o estudo de Komori et al. (2010) e (b) para o presente estudo. A figura mostra a distribuição instantânea da concentração do composto em três planos nos tempos de $t_s^+ = 13$ e 53. As concentrações instantâneas estão adimensionalizadas pela concentração inicial e o escoamento se desenvolve da esquerda para direita.

Analisando as Figuras 4.9 (a) e (b), para o tempo adimensional de 13, pode-se perceber que em ambas encontra-se a presença de estruturas na forma de cogumelos, logo abaixo da interface, que apresentam alta concentração de escalar. Também é possível perceber nas Figuras 4.9 (a) e (b), para o tempo adimensional de 53, que com a evolução do tempo,

vórtices maiores são formados nas direções longitudinal e transversal ao escoamento, levando concentração da interface para o seio da fase líquida.

Uma das principais diferenças entre os resultados do presente estudo e os resultados de Komori et al. (2010) para a distribuição instantânea da concentração na fase líquida é a maior presença da difusão no transporte de massa. Assim, as estruturas formadas pelo transporte de massa da superfície para o líquido aparecem muito mais dispersos nos resultados LES do que nos resultados DNS, para um mesmo intervalo de tempo. Apesar das diferenças no padrão obtidas, tais diferenças são consistentes com as características de cada modelo.

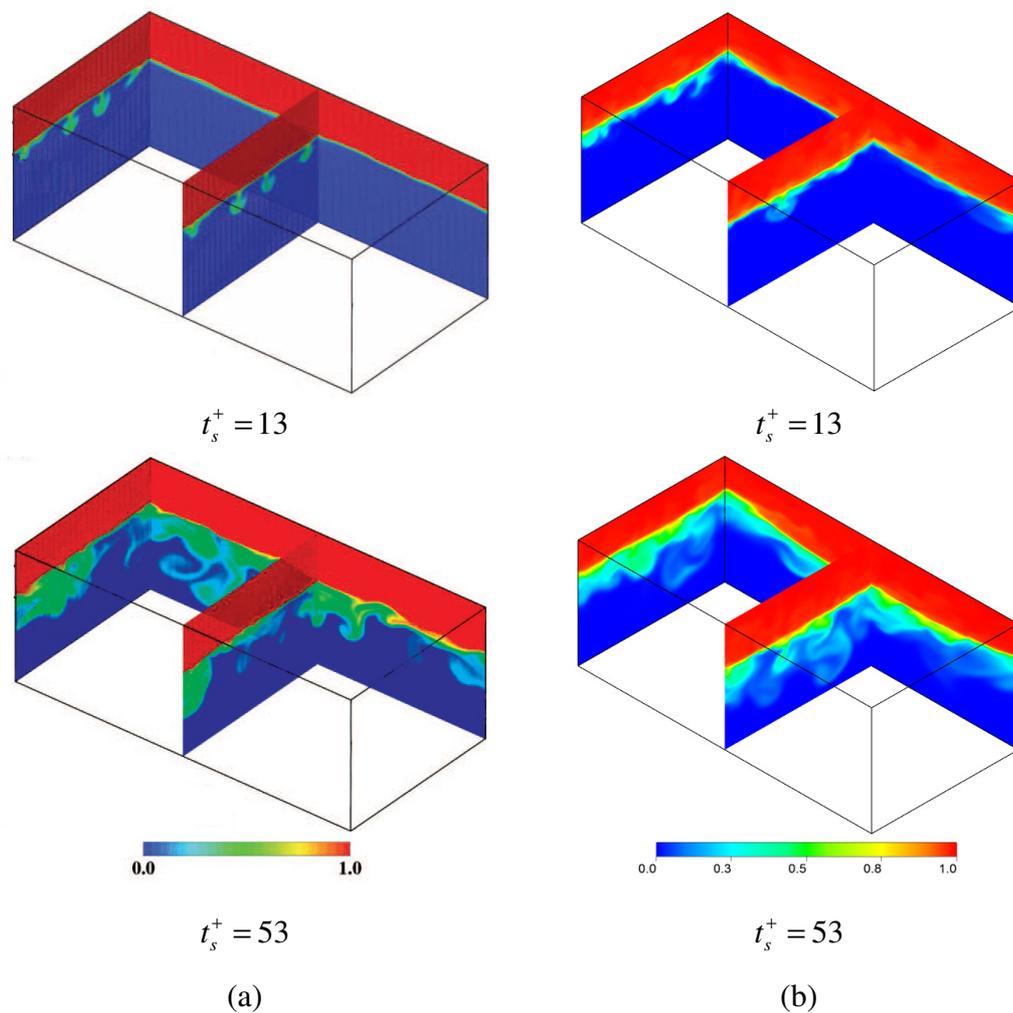


Figura 4.9- Comparação da distribuição da concentração do escalar em t_s^+ iguais a 13 e 53 para: (a) o estudo de Komori et al. (2010) e (b) para o presente estudo.

4.2 COMPORTAMENTO DA INTERFACE PARA OS TRÊS NÚMEROS DE REYNOLDS ESTUDADOS

De acordo com Turney et al. (2005) a velocidade de fricção na interface na fase gasosa deve ser inferior a 0,1 m/s para que não ocorra a formação de ondas na superfície do líquido, sendo esta velocidade um valor intermediário. Baseados no estudo de Turney et al. (2005) e Komori et al. (2010) três velocidades de fricção foram investigadas no presente estudo como pode ser visto na Tabela 4.1.

A Figura 4.10 mostra a configuração da interface para as três velocidades de fricção investigadas no t^+ igual a 160. A altura da interface está adimensionalizada por h e a cor clara corresponde a crista da onda (topo) e a cor escura ao vale da onda. O escoamento se desenvolve da esquerda para a direita. A configuração da onda fica muito evidente na Figura 4.10 (a), Caso 1, com a velocidade de fricção da fase gasosa igual a 0,25m/s, onde pode-se identificar, na interface, três ondas. A maior e a menor altura da interface adimensionalizadas por h , correspondem a 2,10 e 1,93, respectivamente. A Figura 4.10 (a.1) traz um detalhe das pequenas ondas superficiais citadas nos estudos de Komori et al. (2010) e Peirson et al. (2014), as ondas capilares (*ripples*) de curto comprimento e alta frequência geradas principalmente devido a tensão de cisalhamento na superfície da água na presença da velocidade do vento. Neste caso, elas são vistas na região entre uma crista e o início do vale da onda, com característica de curta duração e rápida dispersão no escoamento.

Na Figura 4.10 (b), com velocidade de fricção da fase gasosa igual a 0,1m/s, Caso 2, percebe-se a formação de ondulações na interface, mas com menor definição que no Caso 1. O estudo numérico de escoamento em um tanque usando DNS de Lin et al. (2008) mostra uma configuração de interface similar a Figura 4.10 (b), para uma velocidade de fricção no ar igual a 0,086 m/s em um tempo adimensional próximo ao do presente resultado. Os autores também identificaram para esta velocidade de fricção a presença de ondas capilares na interface. Na Figura 4.10 (b), porém, não ficou clara a presença destas ondas. Neste caso, a maior e menor altura da interface adimensionalizadas por h , correspondem a 2,02 e 1,97, respectivamente. Com as Figuras 4.10 (a) e (b), fica clara a influência da magnitude da velocidade da fase gasosa influenciando na configuração da superfície desde uma maior elevação da interface e uma menor frequência de onda, Caso 1, até uma menor elevação da interface com uma

frequência de onda maior, Caso 2. Tanto para o Caso 1 quanto para o Caso 2, as ondas possuem cristas pouco íngremes a ponto de se encaixar no caso onde não ocorre quebra de ondas ou quebra em micro escala, como visto no trabalho de Peirson et al., 2014 para velocidade de fricção da fase gasosa mais elevadas que do presente estudo. A Figura 4.10 (c), Caso 3, mostra a configuração da interface para a velocidade de fricção igual a 0,05m/s e pode-se perceber que a superfície apresenta-se plana como mencionado no estudo de Turney et al. (2005).

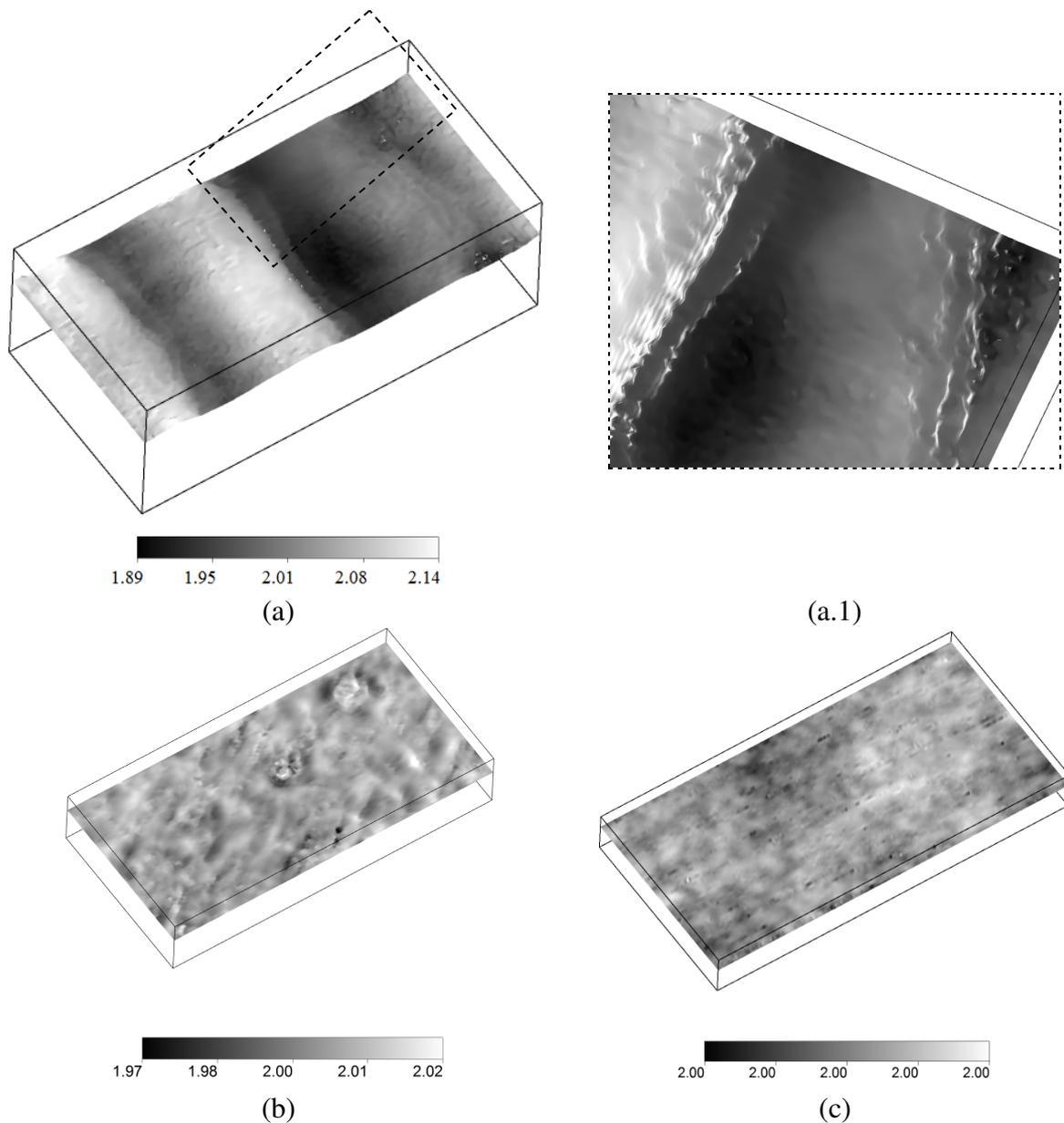


Figura 4.10 - Configuração instantânea da interface líquido-gás no tempo adimensional de 160 para: (a) Caso 1, (b) Caso 2, (c) Caso 3.

A Figura 4.11, mostra a evolução temporal da variação vertical da altura da interface dada pela diferença entre a crista mais alta e o vale mais baixo da onda (H_s), adimensionalizada por h , para os três casos estudados. Pela Figura 4.11 fica claro que as maiores variações de alturas acontecem no tempo final de escoamento e possuem uma tendência a estabilização. Para o Caso 1 a variação máxima de elevação adimensional pode ser vista entre 0,25 e 0,3 e é muito maior que para os demais casos. Para o Caso 2, a interface líquido-gás também mostra uma evolução na variação da altura, sendo o valor máximo atingido em torno de 0,05. O estudo de um escoamento em tanque usando DNS de Lin et al. (2008) e o estudo experimental de tanque de Iwano et al. (2013), mostram valores de variação de altura dimensional também em torno de meio a um milímetro para velocidades de fricção próximas a 0,1 m/s. Para a simulação do Caso 3, pode-se perceber que a superfície permaneceu praticamente plana, sem a formação de ondas. Os resultados estão de acordo com os apresentados por Turney et al. (2005), mostrando que a velocidade de fricção de 0,1m/s é uma velocidade intermediária entre uma superfície com ondas (Caso 1) e uma superfície plana (Caso 3).

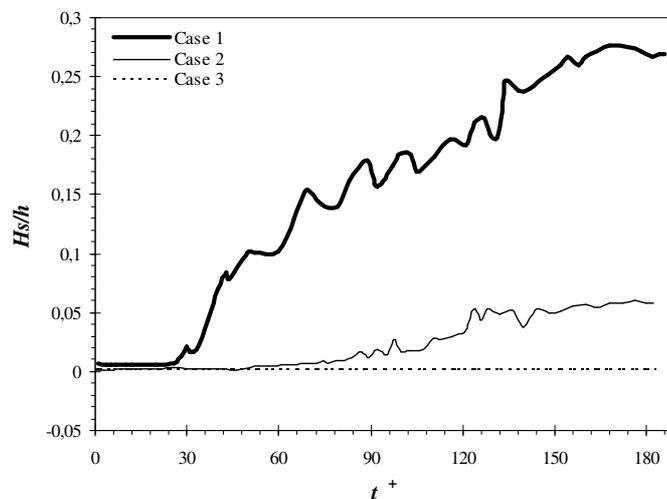


Figura 4.11 - Evolução temporal da variação vertical da altura da interface líquido-gás para os três casos de estudo.

A Figura 4.12 mostra a evolução temporal da velocidade média na interface líquido-gás ($U_{interface}$) adimensionalizada pela velocidade de fricção da fase gasosa para os três casos investigados. Percebe-se que o perfil de velocidade para o Caso 1 é bastante diferente dos demais perfis. Para este caso, a velocidade média na interface cresce até um tempo aproximado de 40 e decresce até aproximadamente 80. A partir de 80 a velocidade permanece

constante. Segundo Komori et al. (2010) o decréscimo da velocidade é devido ao fato da distribuição da velocidade instantânea na interface líquido-gás mostrar valores negativos nos vales devido o escoamento reverso.

Para verificar o comportamento do escoamento reverso na interface líquido-gás como discutido anteriormente, foi gerada a Figura 4.13. Esta figura mostra a configuração da interface para o Caso 1 como mostrado na Figura 4.10 (a), porém com o valor da velocidade instantânea na interface na direção x . As regiões nas cores vermelha e amarela representam os valores de velocidades positivas e estão concentrados nas regiões de crista para vale das ondas. Por outro lado, regiões na cor azul estão concentradas nas regiões de vale para crista das ondas e representam valores negativos de velocidade instantânea. De Angelis et al. (1997) em seu estudo de escoamento em tanque utilizando DNS verificou o mesmo comportamento em superfícies com ondas. Para o Caso 2, a pequena amplitude da onda, não foi suficiente para gerar a formação de fluxo reverso entre a região de crista e de vale, resultado visto anteriormente no estudo de Liu et al. (2008).

A velocidade interfacial instantânea média na interface para o Caso 2 permaneceu inferior ao Caso 1 para tempos adimensionais iniciais e intermediários, mas as velocidades praticamente se igualaram no tempo adimensional final. Isto se deve ao fato da existência de escoamento reverso para o Caso 1 nas regiões entre a crista e vale da onda, como discutido anteriormente. O comportamento da velocidade para os Casos 2 e 3 são semelhantes entre si e também ao caso de superfície plana apresentado no estudo de Komori et al. (2010). Eles são crescentes nos tempos iniciais e tendem a uma curva suavizada e estabilizada para os tempos finais.

4.3 ANÁLISE DO ESCOAMENTO TURBULENTO NA FASE GASOSA

Para as Seções 4.3 e 4.4 a seguir, todas as estatísticas foram calculadas no tempo médio adimensional entre 160 e 180, momento em que a variação vertical da altura da interface e o perfil de velocidade na interface já se apresentavam estabilizados. Em todos os gráficos, y^+ representa a distância a partir da interface até o topo do tanque, para a fase gasosa, e a distância a partir da interface até o fundo do tanque, para a fase líquida.

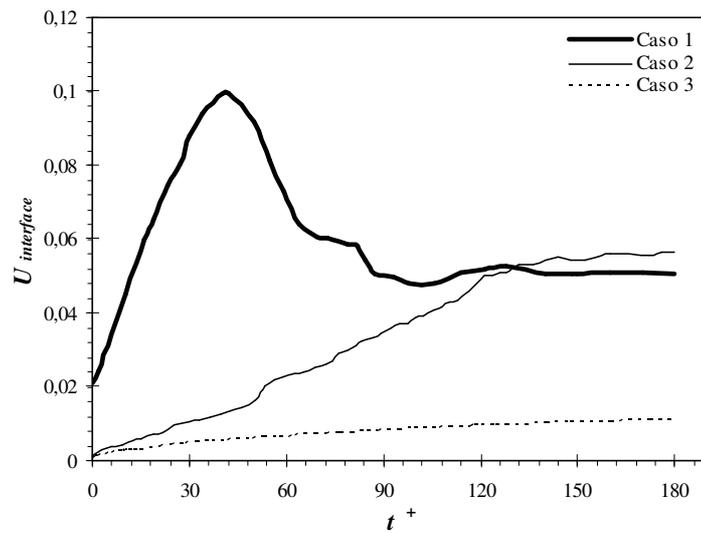


Figura 4.12- Evolução temporal da velocidade média na interface líquido-gás para os três casos de estudo.

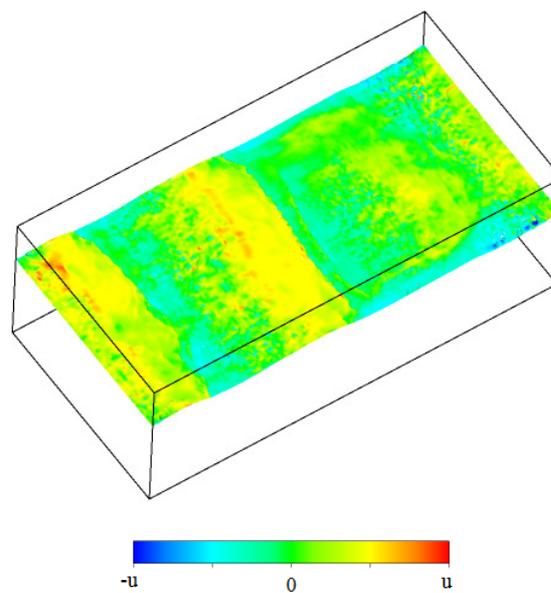


Figura 4.13- Configuração da velocidade instantânea na direção x para $t^+ = 160$.

Para análise do escoamento, a Figura 4.14 mostra a comparação do perfil vertical de velocidade na fase gasosa. Os valores são obtidos a partir de uma média no tempo e no espaço. Os perfis em ambos os casos possuem uma região em que o comportamento é linear até aproximadamente $y^+ \approx 11$ e a partir de $y^+ > 30$, tem-se a camada logarítmica, na qual os efeitos turbulentos são mais significativos. Percebe-se que o perfil para o Caso 3 não evidencia muito a região logarítmica como os demais casos. O mesmo aconteceu nos estudos de escoamento de tanque de Iida e Nagano (1998), Tsukahara et al. (2004) e Tsukahara et al.

(2014) com baixos números de Reynolds (80, 70 e 60), sugerindo um regime de escoamento próximo ao laminar. Percebe-se que os perfis nos Casos 2 e 3 estão deslocados para cima, sugerindo que a espessura da subcamada viscosa torna-se maior que no Caso 1.

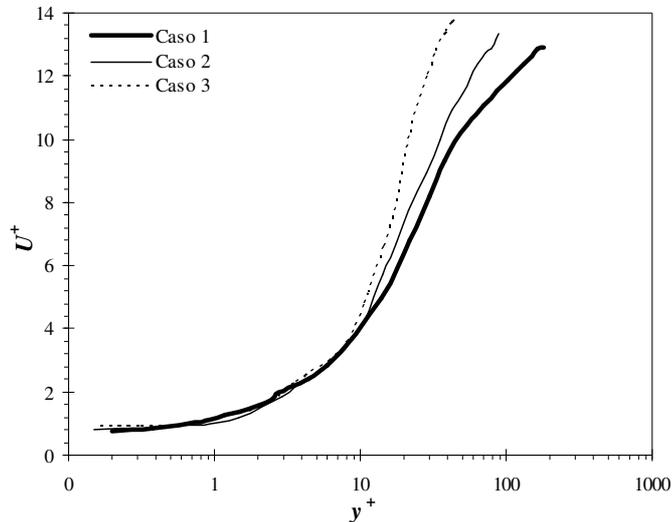
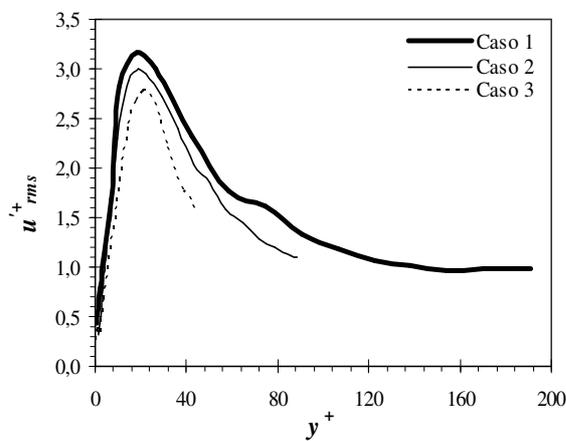


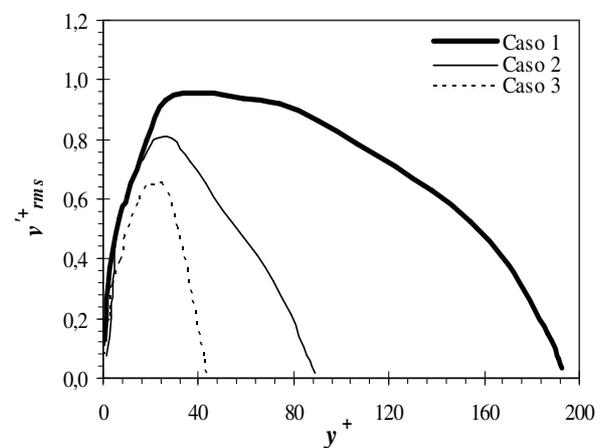
Figura 4.14- Perfil vertical de velocidade do vento na fase gasosa para os três casos de estudo.

A Figura 4.15 mostra a distribuição vertical da intensidade da turbulência nas três direções do escoamento, adimensionalizadas pela velocidade de fricção, $u'_{rms}+$, $v'_{rms}+$ e $w'_{rms}+$. O valor máximo da flutuação de velocidade para as três componentes ocorre em $y^+ \approx 20$. A diferença entre os picos de $u'_{rms}+$, $v'_{rms}+$ e $w'_{rms}+$ ficam em torno de 0,2, entre o Caso 1 e o Caso 2 (Reynolds igual a 210 e 86, respectivamente). Para o estudo de Tsukahara et al. (2004), em um escoamento de tanque, com números de Reynolds de 180 a 70 a maior diferença entre os picos das variáveis mostrou igual magnitude para $v'_{rms}+$ e $w'_{rms}+$ enquanto para $u'_{rms}+$ não ficou visualmente clara a diferença. Para a componente $u'_{rms}+$ a variação entre os Casos 1 e 2 mostra-se também bem inferior que para as demais componentes. Para o Caso 3 é possível notar que o pico de $u'_{rms}+$ acontece um pouco mais afastado da parede em comparação com os demais casos. Este fato é típico de perfil de baixo número de Reynolds o que leva a um escoamento com características próximas a laminarização (IIDA e NAGANO, 1998). De qualquer forma, a variação da intensidade é pequena em relação ao pico dos demais casos. Estas duas análises permitem supor que a distribuição vertical da intensidade da turbulência da componente longitudinal do escoamento é menos influenciada pelo número de Reynolds quando comparada as demais componentes.

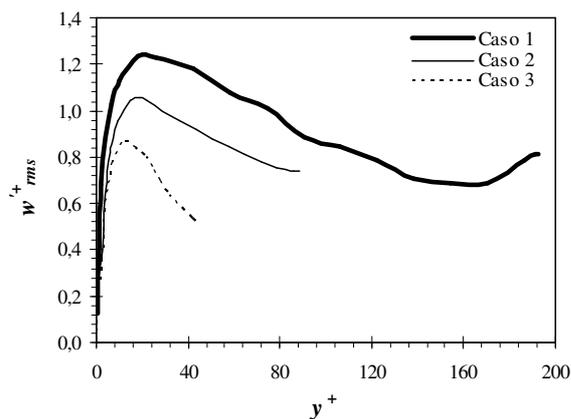
Moser et al. (1999), Abe et al. (2001), Tsukahara et al. (2004), Tsukahara et al. (2014) verificaram em seus estudos de escoamento de tanque, que todas as componentes das variáveis decrescem com o decréscimo do número de Reynolds. Segundo Moser et al. (1999) aparentemente, as flutuações de velocidades são mais sensíveis a variação do número de Reynolds que outras variáveis, mostrando uma distinção nos perfis para os três casos estudados. Segundo Iida e Nagano (1998), um dos efeitos de baixos números de Reynolds, é o aumento da espessura da subcamada viscosa, suprimindo a ocorrência de explosões turbulentas e assim a intensidade da turbulência próxima a parede.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.15- Distribuição vertical da intensidade da turbulência na fase gasosa para os três casos estudados, para as componentes: (a) u'_{rms} , (b) v'_{rms} e (c) w'_{rms} .

As Figuras 4.16 (a) Caso 1, (b) Caso 2 e (c) Caso 3, mostram a distribuição instantânea dos vórtices tridimensionais obtidos pelo critério Q próximos a região da interface para a fase gasosa no tempo adimensional de 160.

O critério Q é um escalar obtido pela equação:

$$Q = \frac{1}{2}(R_{ij}R_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \quad (4.3)$$

com $i= 1, 2, 3$. Na Equação (4.3) R_{ij} e S_{ij} são dados por:

$$R_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.4a)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.4b)$$

Existem regiões onde a rotação é predominante em relação a deformação ($Q>0$) e regiões onde a deformação predomina em relação a rotação ($Q<0$). A fim de visualizar os vórtices turbulentos próximos a interface, isosuperfícies tridimensionais devem ser construídas com valores positivos do critério Q permitindo a identificação de regiões onde a magnitude da rotação é maior que a magnitude da deformação.

Ainda neste contexto, a fim de identificar os vórtices contra rotativos que se concentram próximos a interface, os mesmos foram coloridos pela componente longitudinal da vorticidade (ω_x). Valores positivos de vorticidade ($\omega_x > 0$) são mostrados na cor vermelha e valores negativos ($\omega_x < 0$) são mostrados na cor azul.

Para a Figura 4.16 (a) gerada para o Caso 1 fica evidente a formação de vórtices turbulentos próximos a interface onde verifica-se que para superfícies muito onduladas estes vórtices estão localizados a jusante do ponto entre a crista e o vale da onda, por causa da geometria da interface (DE ANGELIS et al., 1997). Por conseguinte, os vórtices formados são ejetados a partir destas regiões para o seio da fase. Mesmo para superfícies com menores ondulações ou planas, como no Caso 2 e Caso 3, respectivamente, regiões relativamente aleatórias com alta tensão de cisalhamento podem se originar e nelas ocorrerem eventos de varredura e ejeção como visto em Lombardi et al. (1996).

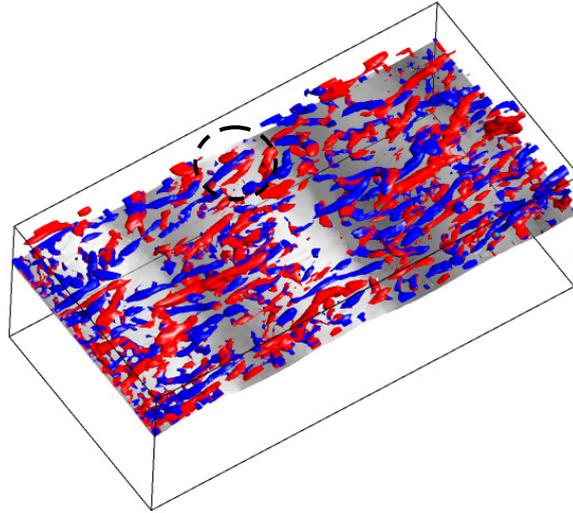
Quando compara-se as regiões de vórtices turbulentos existentes no Caso 1 com os Casos 2 e 3, nota-se que o Caso 1 e o Caso 2 apresentam maior turbulência próxima a interface com vórtices menos alongados e mais desorganizados. Estudos como o De Angelis et al. (1997) atribuem este formato a configuração da interface deformável com ondas.

O presente estudo conseguiu capturar além da região com estruturas coerentes alongadas a presença de vórtices em forma de grampo de cabelo, destacados por círculos tracejados nas Figuras 16 (a), (b) e (c).

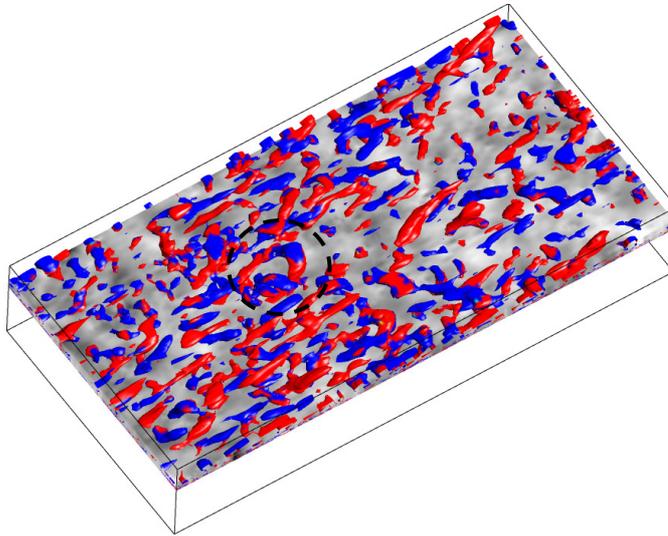
4.4 ANÁLISE DO ESCOAMENTO TURBULENTO NA FASE LÍQUIDA

Todos os casos simulados consideram a fase líquida inicialmente em repouso. Assim, a força motriz que gera o movimento nesta fase é a velocidade da fase gasosa. Dessa forma, as interações que ocorrem na interface líquido-gás serão de fundamental importância para o comportamento da fase líquida.

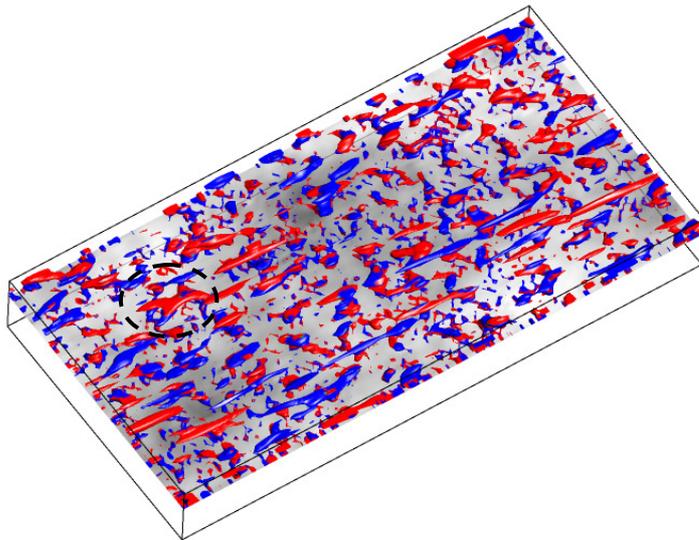
A Figura 4.17 traz o perfil de velocidade adimensional da água. Verificou-se para o Caso 2, com pequenas ondulações, que U^+ nas proximidades da interface líquido-gás onde as forças viscosas ainda são predominantes, apresenta velocidade mais elevada que o Caso 1. Uma justificativa para que a magnitude de U^+ seja maior é que na interface as velocidades são muito próximas como mostrado na Figura 4.12. Por outro lado, mais afastado da interface, para $y^+ > 15$, a velocidade do Caso 1 já é bastante superior a velocidade do Caso 2. Na região longe da interface a transferência de *momentum* é reforçada pela turbulência desenvolvida logo abaixo da interface, principalmente, no Caso 1, onde a ondulação da interface contribui mais acentuadamente para a formação de estruturas turbulentas como citado anteriormente.



(a) Caso 1



(b) Caso 2



(c) Caso 3

Figura 4.16- Isosuperfície instantânea do critério Q na fase gasosa próxima a interface no tempo adimensional de 160.

Para o Caso 3 é possível verificar que o perfil de velocidade vertical apresenta valores menores que para os demais casos desde a interface. Isso indica que a velocidade induzida na fase líquida pela fase gasosa é menor que nos demais casos. Como é possível verificar na Figura 4.12 a velocidade na interface para o Caso 3 é bem menor em todos os tempos que para os dois outros casos. Isto pode estar relacionado a transferência de *momentum* pelos efeitos turbulentos nos Casos 1 e 2, que é mais efetivo devido ao maior nível de turbulência. No Caso 3, devido a menor intensidade da turbulência, a transferência de *momentum* é menos efetiva tanto nas camadas mais próximas a interface quanto no seio da fase.

Comparando as Figuras 4.14 e 4.17 é possível verificar a afirmação de Rashidi e Banerjee (1990), Lombardi et al. (1996), Banerjee e Macintyre (2004), Lin et al. (2008) e Komori et al. (2010) que a fase gasosa "enxerga" a interface líquido-gás com configurações similares a de uma superfície sem deslizamento. Por outro lado, a fase líquida não se comporta da mesma forma. Enquanto na Figura 4.14 observam-se velocidades mais baixas próximas a interface o inverso acontece na Figura 4.17, onde velocidades mais altas são vistas na região próxima a interface.

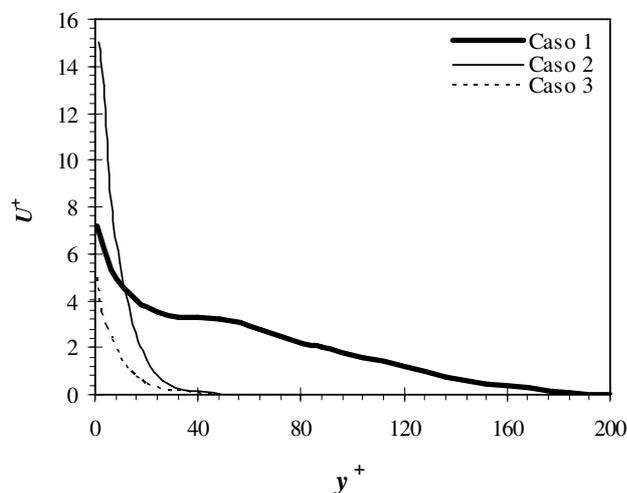


Figura 4.17- Perfil vertical de velocidade na fase líquida para os três casos de estudo.

A Figura 4.18 mostra a distribuição vertical da intensidade da turbulência nas três direções do escoamento, adimensionalizadas pela velocidade de fricção, $u'_{rms}{}^+$, $v'_{rms}{}^+$, $w'_{rms}{}^+$. A intensidade da turbulência mostrada na Figura 4.18 surge da interação entre a fase gasosa, a interface, com o seu respectivo comportamento (ondulada ou plana) até estabelecer o movimento da fase líquida, primeiramente muito próximo a interface. Na análise da velocidade vertical da fase

líquida a partir da Figura 4.17, os Casos 2 e 3 já mostraram perfis com velocidades menores que o Caso 1, principalmente na região mais afastada da interface.

Assim, por consequência dessa interação, para as três direções a intensidade da turbulência para o Caso 1 é muito maior que para os demais casos. Segundo Komori et al. (2010), isso sugere que as ondas geradas na interface, pelo vento, aumentam a turbulência no lado do líquido e o mesmo efeito dessa interação citada, fase gasosa, interface e fase líquida, foi visto em seu estudo quando a intensidade da turbulência em uma superfície indeformável foi comparada com uma superfície com ondas.

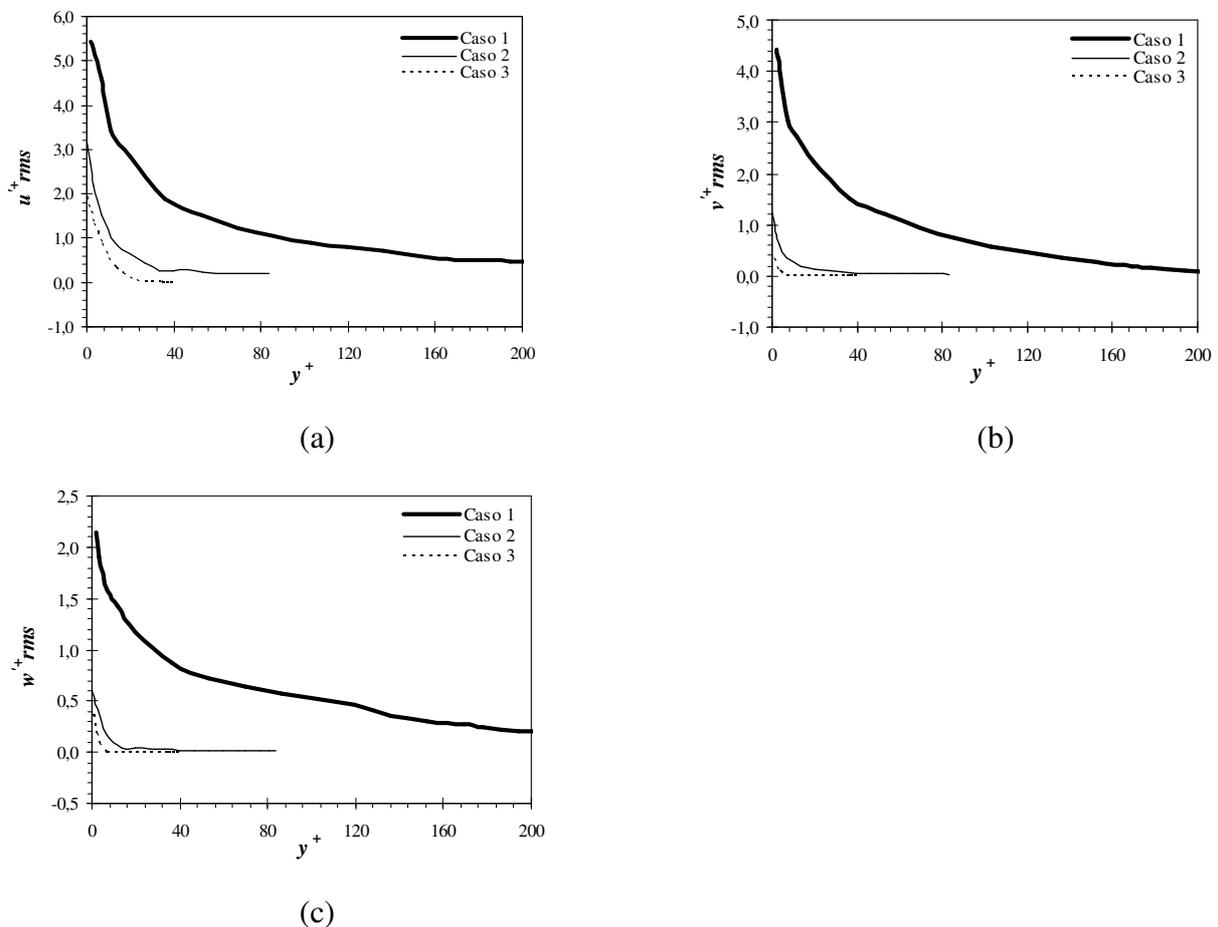


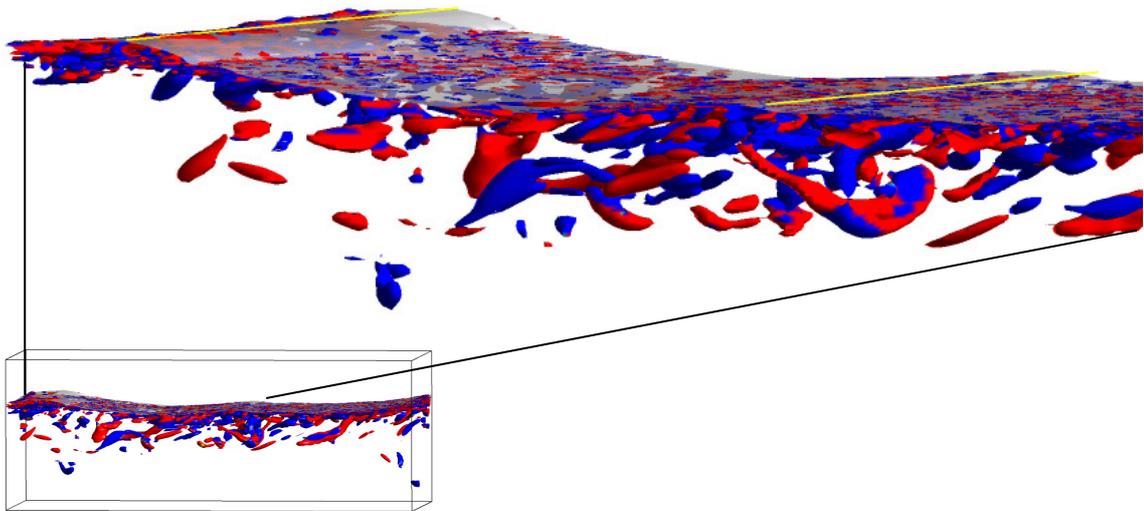
Figura 4.18- Distribuição vertical da intensidade da turbulência na fase líquida para os três casos estudados, para as componentes: (a) u'_{rms} , (b) v'_{rms} e (c) w'_{rms} .

Comparando as Figuras 4.15 e 4.18, pode-se notar a diferença entre as flutuações de velocidade das fases gasosa e líquida próximas a interface. Do lado do gás, a turbulência se

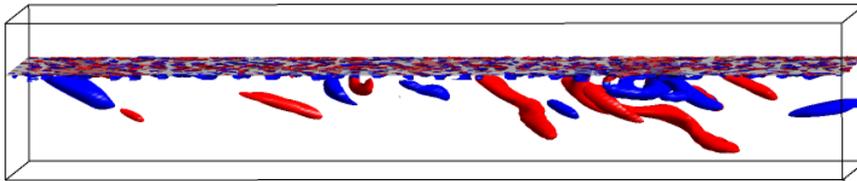
comporta praticamente idêntica ao escoamento sobre uma parede sólida, para as três direções, com as flutuações de velocidade na parede sendo levadas a zero. Por outro lado, a fase líquida, como mostrado na figura anterior, tem as maiores flutuações próximas a interface tanto para o caso com ondas, quanto para o caso de um superfície plana.

Para visualizar o comportamento dos vórtices próximos a interface líquido-gás, na fase líquida, as Figuras 4.19 (a) Caso 1, (b) Caso 2 e (c) Caso 3, foram geradas. Análise análoga aos vórtices presentes na fase gasosa pode ser feita para os vórtices presentes na fase líquida. Para melhor visualização dos vórtices presentes no Caso 1, com ondas, a Figura 4.19 (a) foi gerada com um *zoom* na região da interface entre duas cristas, localizadas pelas linhas amarelas. Nota-se que a turbulência gerada para o Caso 1 é bem maior que para os demais casos e os vórtices turbulentos são, novamente, menos alongados que para os demais casos. Assim como destacado nos estudo de Lombardi et al. (1996) e De Angelis et al. (1997), nota-se no presente estudo que mais vórtices na fase líquida são encontrados quanto maior for o número de Reynolds da fase gasosa. Dessa forma, maior tensão de cisalhamento causado pelo ar na interface líquido-gás acarreta maior turbulência próxima a interface na fase líquida.

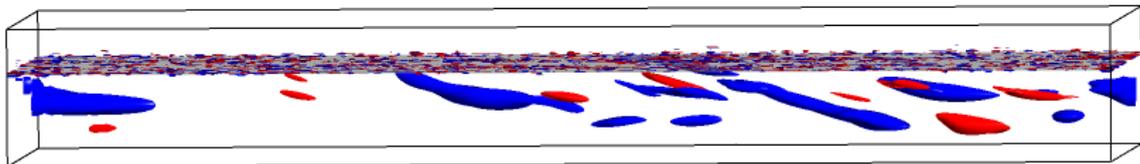
A fim de identificar com mais clareza a turbulência que ocorre abaixo da interface para o Caso 1, com ondas, uma discussão detalhada se inicia a partir da Figura 4.20. Esta figura mostra para o Caso 1 uma isosuperfície da velocidade vertical na fase líquida gerada para o tempo adimensional t^+ igual a 60. Este tempo adimensional foi escolhido, pois servirá para acompanhamento do desenvolvimento da turbulência e posterior análise da transferência de massa na fase líquida associada com a presença de vórtices turbulentos nesta mesma fase. A cor clara mostra locais com velocidade vertical negativa, enquanto a cor escura mostra locais com velocidade positiva. Quando o escoamento torna-se dominado por ondas, a distribuição de velocidade vertical no líquido torna-se alinhada com as ondas (LIN et al., 2008). Nota-se que na crista da onda ocorre uma região de mudança de direção da velocidade vertical, assim regiões de velocidade vertical positiva e negativa surgem nesta região.



(a) Caso 1



(b) Caso 2



(c) Caso 3

Figura 4.19 - Isosuperfície instantânea do critério Q na fase líquida próxima a interface no tempo adimensional de 160.

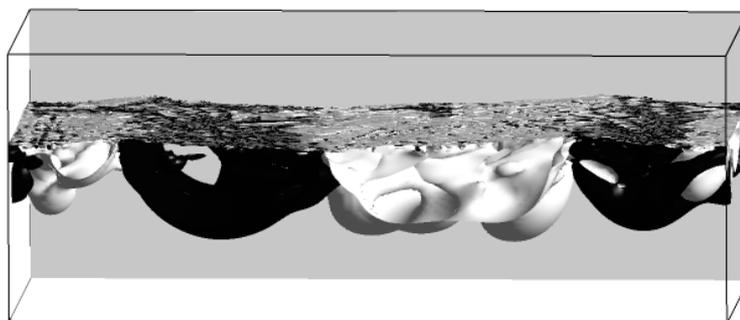


Figura 4.20 - Representação da isosuperfície de velocidade vertical na água para o tempo adimensional de 60.

Para investigar com mais detalhes os vórtices que se formam na superfície líquida na presença de ondas, a Figura 4.21 mostra o campo de velocidade em um plano transversal situado no meio do domínio computacional ($x = 4h$) e a posição correspondente da superfície livre nos tempos adimensionais (a) $t^+ = 59,88$, (b) $t^+ = 59,95$, (c) $t^+ = 60,02$, (d) $t^+ = 60,08$, (e) $t^+ = 60,15$ até (f) $t^+ = 60,22$. As figuras com nomenclatura letra.1, coluna da esquerda, fazem referência a configuração da onda no tempo adimensional de análise. As figuras com nomenclatura letra.2, coluna da direita, fazem referência a configuração do plano transversal ao escoamento e o surgimento de estruturas em forma de cogumelos, que aparecem próximas a interface líquido-gás do lado do líquido, no tempo de análise.

A primeira análise está relacionada a configuração da interface com a presença de ondas, Caso 1, onde o escoamento está da esquerda para a direita e as figuras a seguir serão analisadas em conjunto: Figuras 4.21 (a.1) e (a.2), (b.1) e (b.2), (c.1) e (c.2), (d.1) e (d.2), (e.1) e (e.2) até (f.1) e (f.2), ou seja, a configuração temporal da interface com a formação da estrutura em forma de cogumelo. Assim, na Figura (a.1) escolheu-se localizar o plano transversal (a.2) em uma região atrás da crista da onda próxima a uma região de vale. As estruturas do tipo cogumelo tem origem em regiões côncavas, ou seja, sob uma crista, onde existe uma região ascendente e descendente de fluido. Nesta primeira figura não é possível verificar no plano transversal a presença do vórtice em forma de cogumelo, fato que já era esperado. A onda vai se propagando nas Figuras 4.21 (b.1) e (c.1) e pode-se perceber nas Figuras 4.21 (b.2) e (c.2) que a partir de (c.2) a estrutura em forma de cogumelo começa a aparecer, momento em que a crista da onda começa a se aproximar do plano transversal escolhido. Nas Figuras 4.21 (d.1) e (e.1) é o momento em que o plano está localizado aproximadamente na crista da onda. Assim, nota-se o aparecimento da estrutura em forma de cogumelo em (d.2) e (e.2) no plano transversal ao escoamento escolhido. Em um tempo mais avançado, quando a crista da onda passa pelo plano escolhido, tem-se novamente uma região de vale na Figura 4.21 (f.1) e a estrutura em forma de cogumelo torna-se menos evidente, Figura 4.21 (f.2). É possível notar, a partir dos vetores, que os vórtices se formam a partir de regiões de alta velocidade do fluido seguidos de uma região de baixa velocidade do fluido, formando uma recirculação.

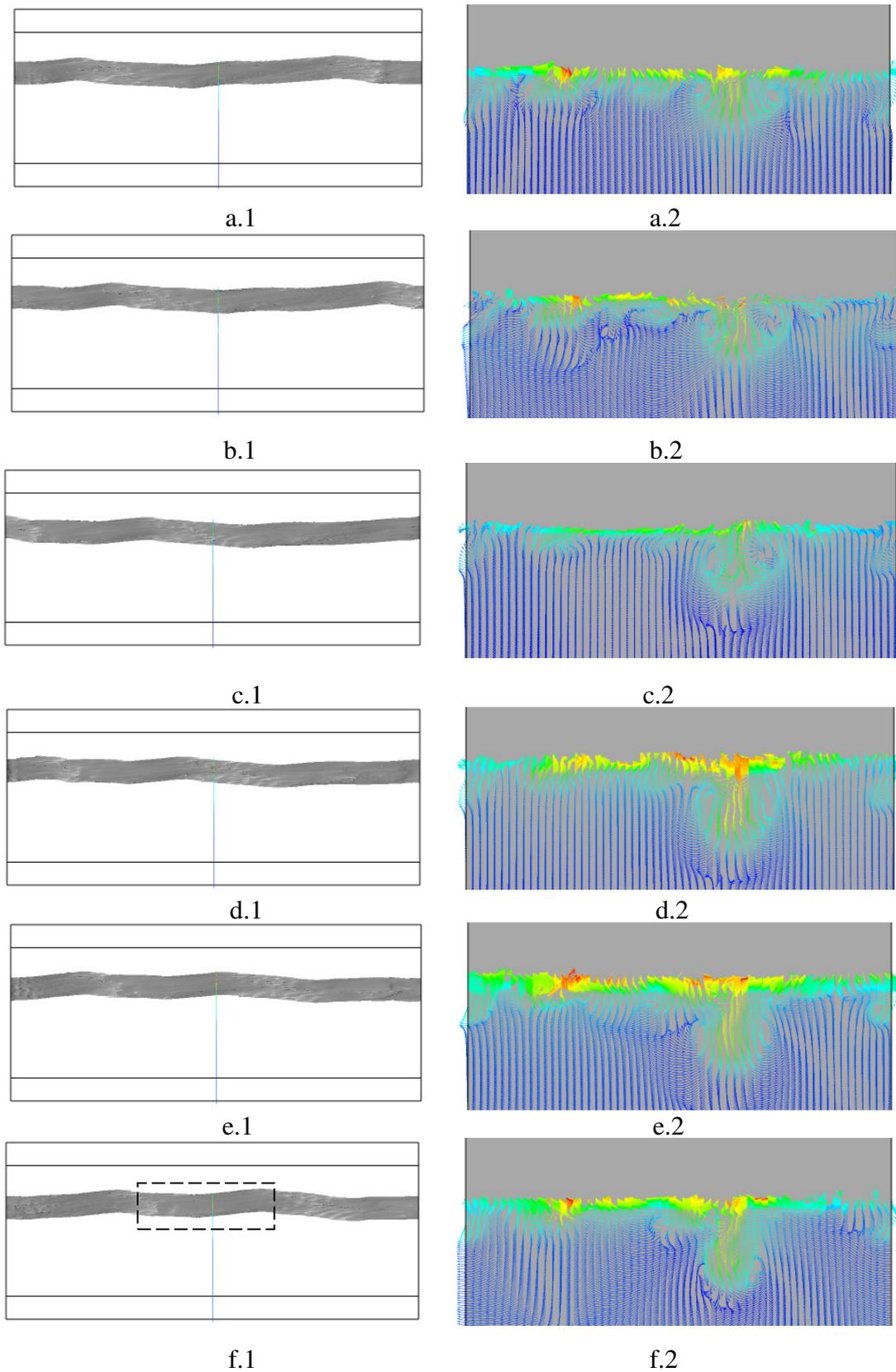


Figura 4.21 - Acompanhamento temporal das estruturas do tipo cogumelo em um plano transversal a direção principal do escoamento (letra.2) a partir da configuração instantânea da interface (letra.1) nos tempos adimensionais de: (a) $t^+ = 59,88$, (b) $t^+ = 59,95$, (c) $t^+ = 60,02$, (d) $t^+ = 60,08$, (e) $t^+ = 60,15$ até (f) $t^+ = 60,22$.

A Figura 4.22 foi gerada a fim de mostrar os vórtices em forma de grampo de cabelo em um plano longitudinal e um plano transversal ao escoamento. Os tempos e as configurações da superfície são as mesmas apresentadas na Figura 4.21. As figuras com nomenclatura letra.1, coluna da esquerda, mostram os vórtices transversais ao escoamento, em particular um vórtice em forma de grampo de cabelo no plano longitudinal ao escoamento. A região escolhida para *zoom*, em todos os tempos, é mostrada no retângulo pontilhado na Figura 4.21 (f.1). As figuras com nomenclatura letra.2, coluna da direita, mostram a configuração do vórtice em forma de grampo de cabelo no plano transversal ao escoamento.

Percebe-se nas Figuras 4.22 (a.1) a (f.1), a partir de um *zoom* dado em uma região cortada pelo plano transversal escolhido, a presença de vórtices longitudinais e de um vórtice em forma de grampo de cabelo, como visto no estudo numérico de Komori et al. (2010). Assim como em região de parede, surgem na fase líquida, estruturas primárias em forma de filamentos que vão se deformando em ondulações transversais logo após a passagem de uma onda. Ainda em relação a estas figuras e fazendo um paralelo com a Figura 4.20, nota-se que o vórtice possui seu "corpo" empurrado pelo campo de velocidade saindo de uma posição oblíqua para uma posição quase que vertical conforme a onda vai se propagando.

As Figuras 4.22 (a.2) a (f.2) trazem uma associação entre as estruturas em forma de cogumelo com os vórtices em forma de grampo de cabelo contra-rotativos no plano transversal, mostrando que a geração de vórtices turbulentos é tridimensional e afetado pelo movimento oscilatório da superfície.

A fim de verificar a evolução da turbulência com o tempo, o plano transversal ao escoamento continuou sendo monitorado para os tempos seguintes e a Figura 4.23 foi gerada para: (a) $t^+ = 80$, (b) $t^+ = 100$, (c) $t^+ = 120$, (d) $t^+ = 130$ e $t^+ = 160$. Conforme o escoamento na fase líquida vai ficando mais turbulento percebe-se que o escoamento fica menos organizado próximo a interface líquido-gás e passa a não ser possível, com tanta facilidade, identificar individualmente a presença de estruturas coerentes citadas anteriormente já que o escoamento encontra-se bem misturado.

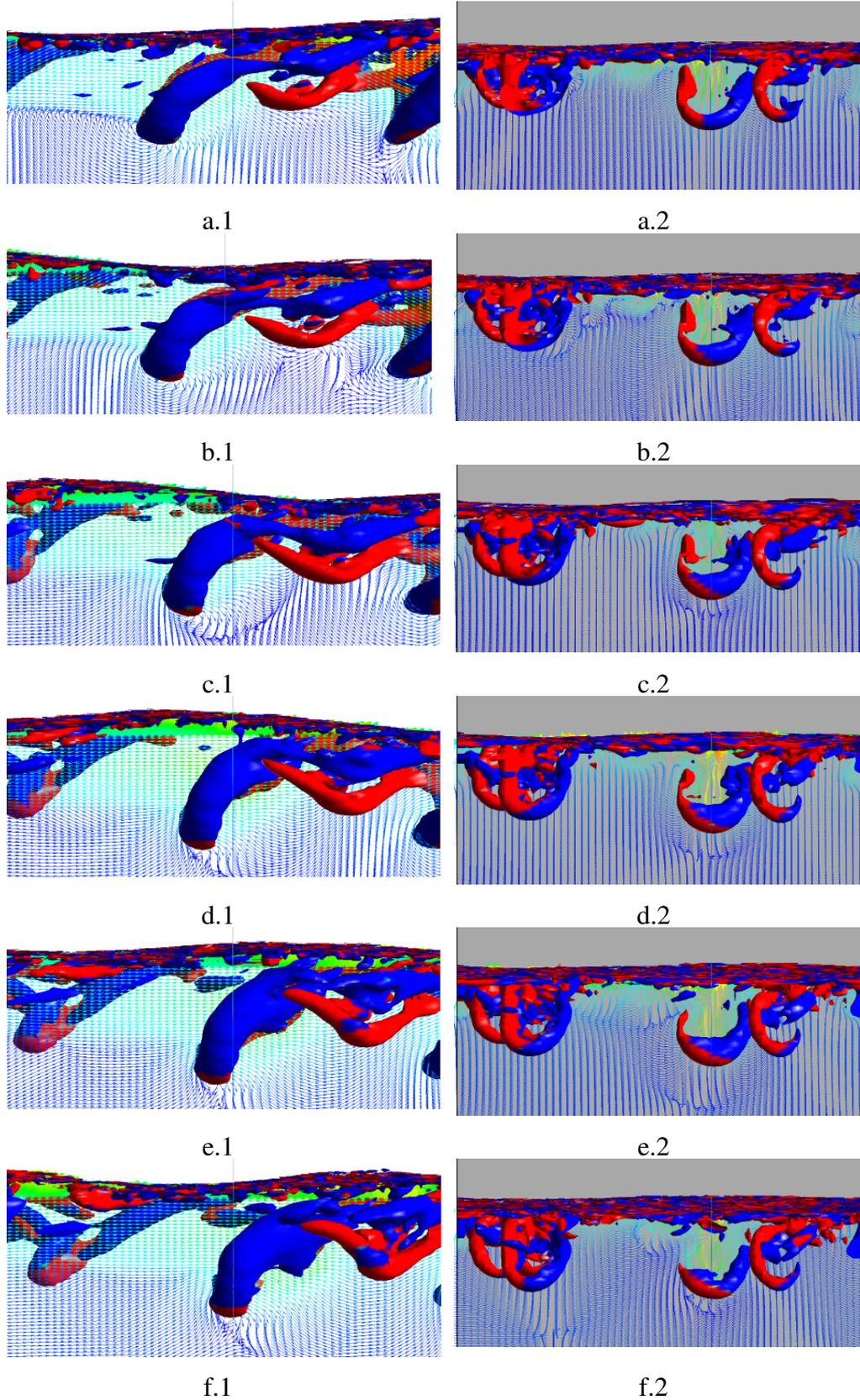


Figura 4.22 - Acompanhamento temporal dos vórtices do tipo grampo de cabelo em um plano transversal (letra.1) e longitudinal ao escoamento (letra.2) a partir da configuração instantânea da interface nos tempos adimensionais de: (a) $t^+ = 59,88$, (b) $t^+ = 59,95$, (c) $t^+ = 60,02$, (d) $t^+ = 60,08$, (e) $t^+ = 60,15$ até (f) $t^+ = 60,22$.

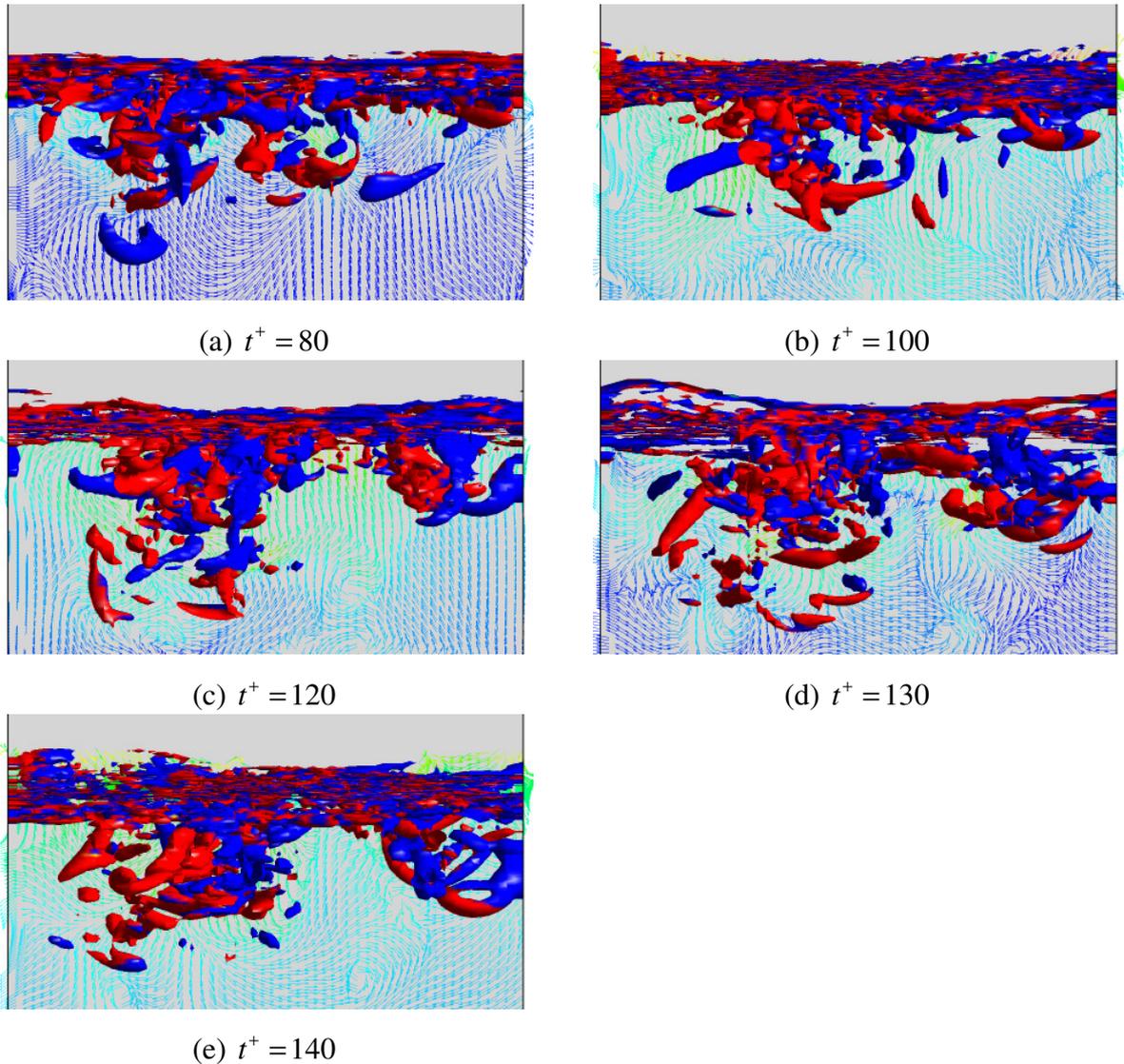


Figura 4.23 - Acompanhamento temporal dos vórtices transversais nos tempos adimensionais de: (a) $t^+ = 80$, (b) $t^+ = 100$, (c) $t^+ = 120$, (d) $t^+ = 130$, (e) $t^+ = 160$.

4.5 ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA PARA TRÊS NÚMEROS DE REYNOLDS ESTUDADOS

A transferência de massa da concentração de um composto da fase líquida para a fase gasosa é calculada para os três casos de estudados, desde uma superfície com ondas (Caso 1), uma superfície com pequenas ondulações (Caso 2) até uma superfície plana (Caso 3). O tempo adimensional escolhido para o início do estudo da transferência de massa é de 47, quando as ondas na superfície ondulada já estavam bem desenvolvidas. Assim, este tempo corresponde ao tempo adimensional de concentração t_s^+ igual a zero.

Os valores dos coeficientes de transferência de massa, k_l , ao longo do tempo, para os três casos estudados são mostrados na Figura 4.24. k_l foi calculado como mostrado na equação 4.1. A concentração no seio da fase foi definida por Magnaudet e Calmet (2006) como sendo a concentração em $y = 0,6 \times 2h$.

O valor do coeficiente de transferência de massa depende da difusividade do gás na água e dos movimentos da fase líquida que afetam o gradiente de concentração do gás na fina camada próxima a interface. Assim, em escoamentos turbulentos, a camada de concentração é muito fina e a transferência de massa é controlada pelos movimentos do fluido próximo a interface. Os vórtices turbulentos ajudam a diminuir a espessura da camada limite de concentração. Dessa forma, aumentam o gradiente de concentração entre a interface e o seio da fase, fazendo com que a transferência de massa seja maior para números de Reynolds maiores quando comparado a um caso laminar ou com baixo Reynolds. Como o problema modelado neste estudo trata-se de um tanque, toda a turbulência presente em ambas as fases foi gerada próxima a interface e como visto nas seções anteriores a turbulência maior é a turbulência gerada nas fases líquida e gasosa para a superfície com ondas quando comparada aos demais casos. Este fato torna bastante relevante a comparação entre a transferência de massa ocorrendo em superfícies planas e onduladas.

Assim, é possível perceber que os valores de k_l mostram-se mais elevados nos casos com ondas e ondulações, Caso 1 e Caso 2, respectivamente, quando comparados ao caso de uma superfície plana, Caso 3. Embora nos Casos 1 e 2, k_l se aproxime gradualmente de um determinado valor, estabilizando a curva, para o caso com ondas na superfície os valores de k_l são sempre maiores para todos os tempos com um perfil muito mais inclinado nos tempos iniciais, mostrando uma brusca transferência de massa no início da simulação, quando a concentração do composto é colocada no tanque para uma turbulência já bastante desenvolvida.

A curva de k_l para o Caso 2 mostra maiores valores e também uma inclinação um pouco mais íngreme quando comparado com o Caso 3. Assim, nota-se que a curva de k_l para o Caso 3 é mais suave que para os demais casos dando sinais de que a hidrodinâmica do escoamento está tendo menos influência na transferência de massa que nos demais casos. Este comportamento se assemelha ao comportamento da curva de k_l apresentado no estudo de Komori et al. (2010) considerando uma superfície indeformável, com valores mais baixos ao

longo do tempo para intensidade da turbulência e coeficiente de transferência de massa da fase líquida k_l .

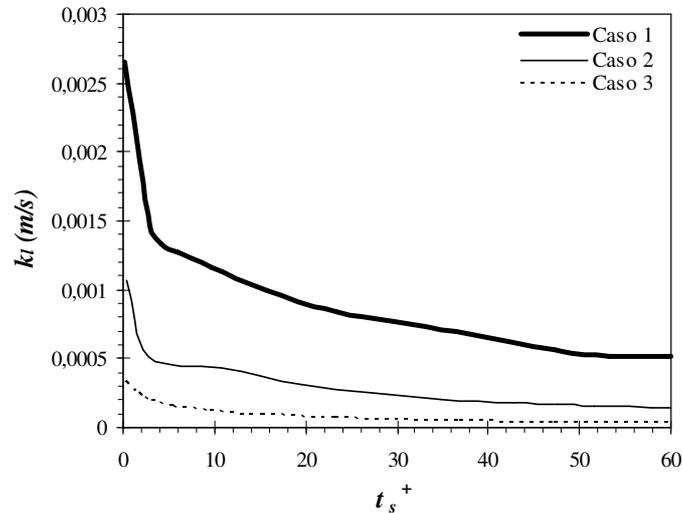


Figura 4.24 - Coeficiente de transferência de massa para os três casos de estudo.

Ao longo dos anos, modelos físicos foram desenvolvidos (LEWIS e WHITMAN, 1924, HIGBIE, 1935 e DANCKWERTS, 1951) para o cálculo do coeficiente de transferência de massa. Com base nestes modelos pioneiros, outros autores conseguiram estimar o valor de k_l sem precisar fazer medições consideradas muito difíceis, tais como: o valor da espessura do filme líquido ou o tempo de renovação da superfície. Autores como Banerjee et al. (2004), Magneudet e Camet (2006), Turney e Banerjee (2010), Gualtieri e Doria, 2012, Turney e Banerjee (2013), fizeram uma revisão sobre estes equacionamentos.

Proposta originalmente por Banerjee et al. (1968), a equação (4.5) foi escolhida para uma análise quantitativa do coeficiente de transferência de massa encontrado neste trabalho. A equação é proposta para estudos onde a interface não possui deformação e no presente estudo pretende-se verificar se ela poderia ser aplicada para o caso de ondulações na interface.

$$kl = cu'Sc^{-1/2} Re_t^{-1/4} \quad (4.5)$$

A constante c é da ordem de $O(1)$. $Re_t = 2u''L/\nu$ e u'' são os números de Reynolds e uma macro escala de velocidade relacionada a turbulência na altura L . Magnaudet e Calmet (2006) parametrizaram L como sendo igual a $0,4h$, quando a superfície livre começa a amortecer as flutuações verticais de velocidade e $u'' = 0,7u_*$.

A partir da equação anterior, autores que estudam a transferência de massa na interface líquido-gás em regime turbulento, constantemente tentam correlacionar os seus resultados, experimentais ou numéricos, a expressões que correlacionam k_l com Re e Sc . Magneudet e Calmet (2006) utilizaram a equação 4.5 com valor de c igual a 0,31 para avaliar seus resultados numéricos. Segundo Theofanous et al. (1976) para o seu estudo um valor ótimo seria de 0,25.

Para o presente estudo a equação (4.5) foi utilizada com coeficiente c igual a 0,24 para correlacionar os valores dos coeficientes de transferência médios, no espaço e no tempo, simulados, com os gerados pela equação. O valor de 0,24 foi ajustado para atender principalmente o Caso 3. Não é possível ajustar uma curva com apenas 1 ponto, mas já era esperado que os demais pontos não se encaixariam perfeitamente em cima da curva devido a deformação da superfície. A Figura 4.25 mostra este resultado.

Como o ajuste da curva foi feito para atender o Caso 3, com superfície plana, o ponto está localizado sobre a curva. Para o Caso 2, quando a superfície possui algumas ondulações, mesmo que em torno de meio milímetro o ponto já fica um pouco fora da curva, mas ainda com boa previsão. Para o Caso 1 com uma superfície com maiores ondulações percebe-se que a equação 4.5 subestima em muito o valor do coeficiente de transferência de massa. Dessa forma, fica ainda mais evidente a contribuição da turbulência desenvolvida na interface, na presença de ondas, favorecendo a transferência de massa do composto entre as fases.

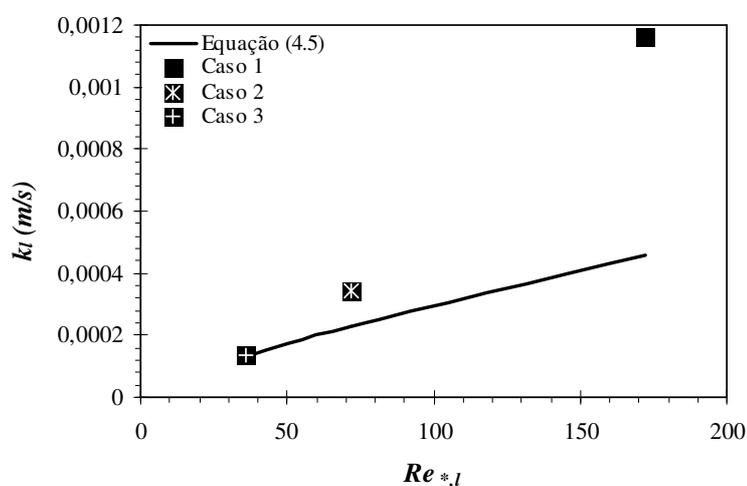


Figura 4.25 - Comparação da mensuração de k_l a partir da Equação (4.5) e da simulação do presente estudo.

Analisando as Figuras 4.24 e 4.25, é possível verificar uma afirmação feita por Komori (2012), de que k_l mensurado para um tanque com superfície deformável e ação dos vórtices turbulentos da fase gasosa na interface é aproximadamente uma ordem de grandeza maior que k_l mensurado para uma superfície indeformável com condição artificial imposta na interface. Verifica-se ainda que quanto maior a velocidade do vento da fase gasosa, maior será a deformação da interface, com presença de maior intensidade de turbulência nas fases líquida e gasosa e aumento da transferência de massa da fase líquida. Este fato foi verificado por Rashidi e Banerjee (1990), De Angelis et al. (1997), Banerjee e Macintyre (2004), Lin et al. (2008), Komori et al. (2010), Peirson et al. (2014) e Takagaki et al. (2015).

A Figura 4.26 permite verificar o comportamento do perfil de concentração na presença de vórtices longitudinais e transversais ao escoamento próximos a interface líquido-gás. A figura mostra a distribuição instantânea da concentração do escalar em três planos nos tempos adimensionais de concentração iguais a (a) $t_s^+ = 13$ ($t^+ = 60$) e (b) $t_s^+ = 113$ ($t^+ = 160$). As concentrações instantâneas estão adimensionalizadas pela concentração inicial e o escoamento se desenvolve da esquerda para direita.

A primeira análise a ser feita é que as Figuras 4.26 (a.1), (b.2) e (c.2), apresentam no plano transversal ao escoamento estruturas na forma de cogumelos, logo abaixo da interface, onde ocorrem elevados valores de concentração. Estas estruturas estão mais evidentes para o Caso 1 e Caso 2 onde a presença de ondas na interface favorecem a sua formação. Para essa análise, a Figura 4.27 mostra um *zoom* do plano transversal localizado no centro do domínio para que se possa identificar uma estrutura na forma de cogumelo em conjunto com a distribuição de concentração que ocorre na presença dela. A Figura 4.27 (a) foi gerada no t_s^+ igual a 13 para o Caso 1 e a formação dessa estrutura na fase líquida pode ser vista na sequência de Figuras 4.21 (a.2) a (e.2). Pode-se notar que a estrutura com alta velocidade ejeta concentração da interface para o seio da fase líquida. Neste movimento, fluido do seio da fase com alta concentração chega até a interface favorecendo a renovação de fluido na área de recirculação. A Figura 4.27 (b) gerada para t_s^+ igual a 113 para o Caso 2, mostra também a formação dessa estrutura auxiliando na transferência de massa, porém para um tempo mais avançado que no caso anterior.

Não foi possível identificar, por meio de vetores de velocidade, a formação de estrutura em forma de cogumelo para o Caso 3, Figura 4.26 (c.1) e (c.2), superfície plana. Apesar da fase líquida apresentar características de comportamento turbulento, como visto na análise do escoamento, torna-se evidente para o Caso 3 que o perfil de concentração desenvolvido se comporta como em um escoamento em regime pouco turbulento (quase laminar), com a concentração se espalhando quase que em forma de lâminas para t_s^+ igual a 13, Figura 4.26 (c.1).

As Figuras 4.26 (a.2), (b.2) e (c.2) apresentam planos de concentração em um tempo mais avançado para os Casos 1, 2 e 3, respectivamente. Nestas figuras o tempo considerado foi de $t_s^+ = 113$. Nota-se clara diferença de concentração que ocorre no plano longitudinal para o Caso 1 em comparação com os demais casos. A Figura 4.26 (a.2) mostra uma mistura maior de concentração com a presença relevante de vórtices turbulentos. Para os demais casos este fato não é tão evidente.

A Figura 4.28 mostra o fluxo de massa instantâneo na interface líquido-gás em t_s^+ igual a 113 para os três casos de estudo. O fluxo está adimensionalizado pela velocidade de fricção e pela concentração inicial no tanque como foi feito no estudo de Takagaki et al. (2015).

Nota-se que as escalas de cores para os três casos são muito diferentes. Raias de fluxo são geradas na interface devido os vórtices presentes logo abaixo dela na fase líquida. Assim a distribuição do fluxo revela que no caso com ondas maiores, Figura 4.28 (a) raias mais dispersas e em maior escala são encontradas. Em contra partida, para o Caso 3, Figura 4.28 (c) as raias de concentração aparecem mais organizadas e alongadas. Isso se deve ao fato de que, neste tipo de escoamento, com superfície plana, os vórtices longitudinais presentes no escoamento logo abaixo da interface na fase líquida serem longitudinais alongados. Para o Caso 2, Figura 4.28 (b) as raias de fluxo aparecem também dispersas como para o Caso 1, porém com regiões de fluxo mais definidas. Este fato já era esperado, já que, a interface deformável com ondas, aumenta a turbulência e "quebra" dos vórtices longitudinais do lado do líquido. Esta característica pode ser vista na Figura 4.19.

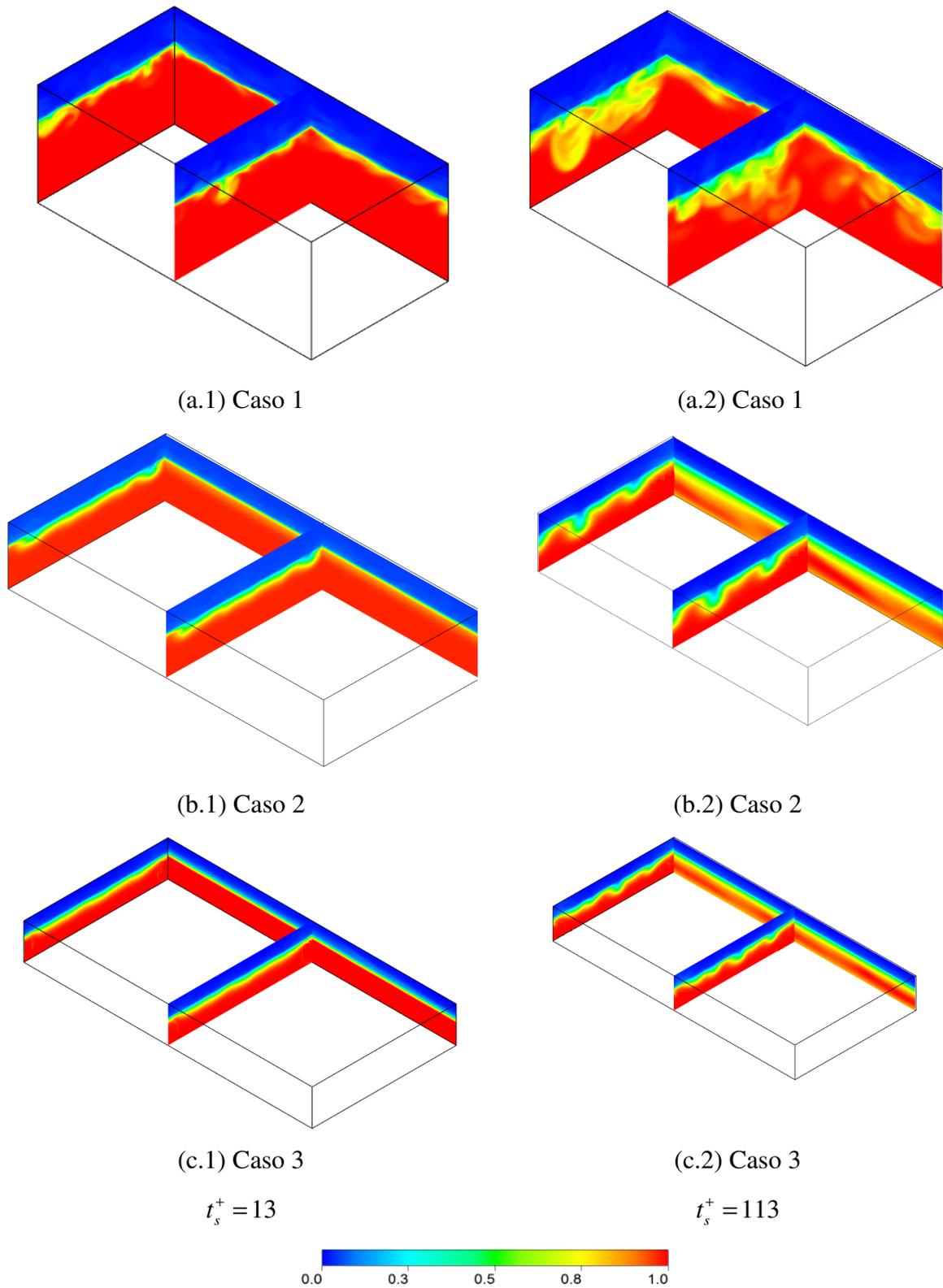


Figura 4.26 - Distribuição instantânea da concentração do escalar nos tempos adimensionais de (a) 13 e (b) 113 para os três casos de estudo.

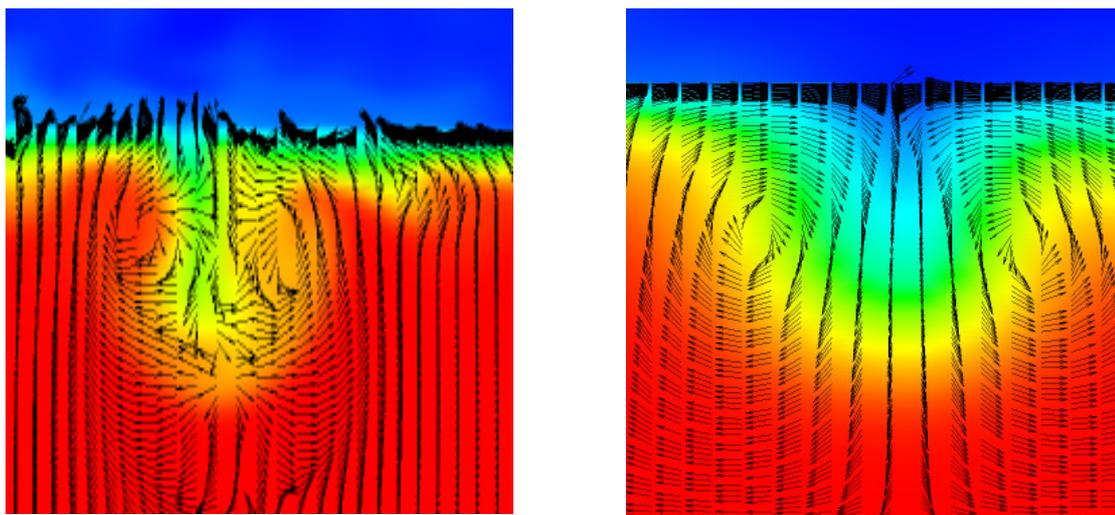
(a) Caso 1, $t_s^+ = 13$ (b) Caso 2, $t_s^+ = 113$

Figura 4.27 - *Zoom* da interface líquido-gás para identificar uma estrutura na forma de cogumelo em um plano transversal ao escoamento transportando concentração, para os Casos 1 e 2.

Na Figura 4.28 (a) é possível perceber que os picos de concentração ocorrem em regiões onde predominam as ondas capilares. Komori et al. (2010), Peirson et al. (2014) e Takagaki et al. (2015) identificaram a região compreendida por ondas capilares como região de alta vorticidade e turbulência que auxilia na transferência de massa. De fato, Macintyre (1971) demonstrou teoricamente que além da turbulência na interface, a presença de ondas capilares ajudam na diminuição da camada difusiva de concentração aumentando a transferência de massa e conseqüentemente o fluxo de massa nestas regiões em até 3,5 vezes.

Para o Caso 2, não foi possível verificar a formação de ondas capilares, como discutido anteriormente na análise do escoamento. Porém, o fluxo na Figura 4.28 (b) mostra que existe, na interface, regiões isoladas com alto fluxo de concentração. Este fato sugere que ocorre na interface, regiões com presença de alta vorticidade e turbulência, característica de ondas capilares.

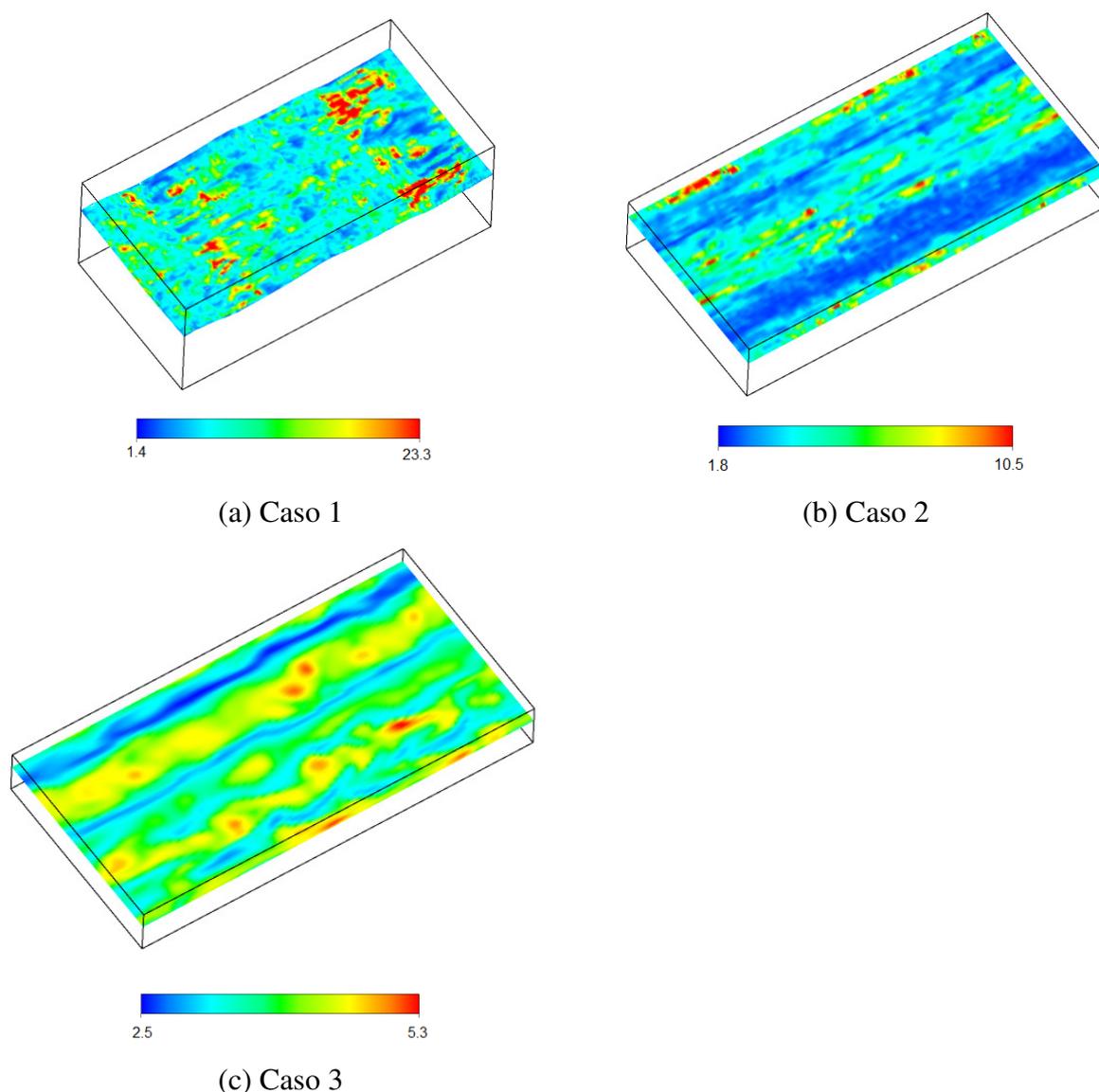


Figura 4.28 - Distribuição do fluxo de massa turbulento da fase líquida para a fase gasosa na interface líquido-gás para t_s^+ igual a 113.

4.6 INFLUÊNCIA DA CONSTANTE DE HENRY NA TRANSFERÊNCIA DE MASSA

Os compostos escolhidos para o estudo deste trabalho estão relacionados aos encontrados nas emissões das estações de tratamento de efluentes (STUETZ E FRECHEN, 2001) e possuem alta, moderada ou baixa volatilização que influencia a transferência de massa do composto na interface líquido-gás. Dessa forma, considerando as duas características descritas, os compostos escolhidos foram: sulfeto de hidrogênio, com constante de Henry igual a 8×10^{-1} , neste caso, a fase líquida é a controladora do processo de transferência de massa. O segundo composto escolhido foi a amônia, com constante de Henry em torno de 5×10^{-4} , sendo ambas

as fases importantes para o transporte de massa. Por último, o ácido valérico foi escolhido com constante de Henry em torno de 2×10^{-5} , sendo a fase gasosa a controladora do processo de transferência de massa. Os valores das constantes de Henry foram escolhidas a partir do estudo de Hudson e Ayoko (2008).

A influência da constante de Henry na transferência de massa entre as fases e a nítida diferença entre a fase gasosa ou a fase líquida controlando o processo de transferência de massa é vista claramente nos perfis de concentração em ambas as fases na Figura 4.29. A figura traz a concentração instantânea adimensionalizada pela concentração inicial da fase líquida no tempo adimensional de 340. A simulação utilizada para verificar a influência da constante de Henry na transferência de massa é a simulação do Caso 1 em que ocorre a formação de ondas na interface líquido-gás. As concentrações do composto na fase líquida e na fase gasosa são representadas, respectivamente, por C_l e C_g , respectivamente.

Para a primeira das três constantes de Henry analisadas, 8×10^{-1} , onde a fase líquida controla o processo transferência de massa, a transferência foi intensificada em comparação com os demais casos e mostra-se mais alta que para os demais casos, como pode ser visto na Figura 4.29 (a). As figuras mostram também uma descontinuidade de concentração na interface, como já era esperado e esta descontinuidade é proporcional a constante de equilíbrio. Dessa forma, nota-se que as concentrações na fase gasosa para as constantes de Henry iguais a 5×10^{-4} e 2×10^{-5} , Figuras 4.29 (b) e (c) possuem uma variação muito grande de magnitude quando comparados com o maior número de Henry estudado.

A partir dos resultados gerados, pode-se estimar o coeficiente de transferência de massa global da fase líquida, K_L , para os três casos e correlacioná-los com a constante de Henry. Para esta análise os valores estão organizados na Tabela 4.3 e foram correlacionados pela equação $1/K_L = 1/k_l + 1/k_g K_H$.

Para o primeiro caso, onde K_H é igual 8×10^{-1} , ou seja, muito maior que K_H igual a 10^{-3} , o valor de Henry crítico estabelecido no estudo de Schwarzenbach et al. (2003) e Hudson e Ayoko (2008), espera-se que $K_L \approx k_l$. Percebe-se neste caso, que $1/k_l$ em relação a $1/k_g K_H$ é

duas ordens de grandeza maior. Assim, verifica-se que o valor do coeficiente global de transferência de massa, para este caso, é mesmo dependente da fase líquida.

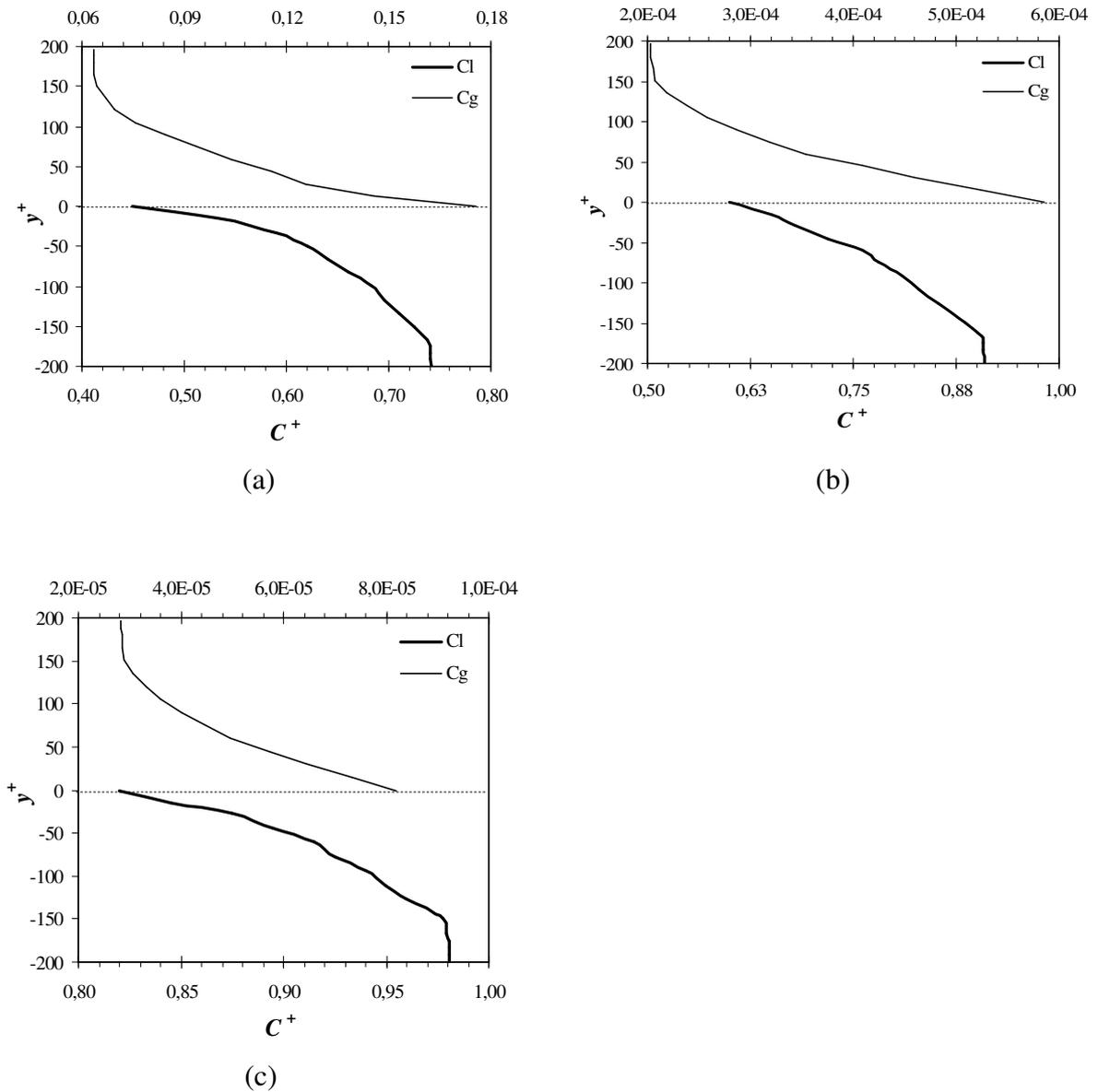


Figura 4.29 - Perfil de concentração para os três números de Henry estudados, sendo (a) $K_H = 8 \times 10^{-1}$, com a fase líquida controladora do processo, (b) $K_H = 5 \times 10^{-4}$, ambas as fases importantes para a transferência de massa e (c) $K_H = 2 \times 10^{-5}$, fase gasosa mais importante que a fase líquida na transferência de massa do composto. As concentrações do composto na fase líquida e na fase gasosa são representadas, por C_l e C_g , respectivamente.

Para o caso em que K_H é igual a 5×10^{-4} , ou seja, próximo ao K_H crítico, espera-se que ambas as fases sejam importantes para o processo de transferência de massa. Nota-se neste caso, que $1/k_l$ em relação a $1/k_g K_H$ possuem a mesma ordem de grandeza. Assim, o coeficiente global de transferência de massa da fase líquida é dependente dos dois coeficientes locais, da fase líquida e da fase gasosa.

Para o terceiro caso analisado, onde K_H é igual 2×10^{-5} , ou seja, muito menor que o crítico, espera-se que $K_L \approx k_g K_H$. Percebe-se neste caso, que $1/k_l$ em relação a $1/k_g K_H$ é uma ordem de grandeza menor. Assim, verifica-se que o valor do coeficiente global de transferência de massa, para este caso, é mais dependente da fase gasosa que da fase líquida.

Tabela 4.3 - Valores da constante de Henry correlacionados ao coeficiente de transferência de massa.

K_H	k_l	k_g	$1/k_l$	$1/k_g K_H$	K_L
8×10^{-1}	5.32×10^{-4}	1.85×10^{-1}	1.88×10^3	6.76	5.30×10^{-4}
5×10^{-4}	2.38×10^{-8}	1.53×10^{-4}	4.20×10^7	1.31×10^7	1.82×10^{-8}
2×10^{-5}	6.20×10^{-9}	8.22×10^{-6}	1.61×10^8	6.08×10^9	1.60×10^{-10}

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Uma simulação numérica de um escoamento multifásico utilizando LES foi realizada neste trabalho para verificar as estruturas turbulentas presentes nos dois lados da interface líquido-gás, a configuração da interface e analisar a influência na transferência de massa de compostos entre as fases. Três configurações de superfícies foram estudadas: uma superfície com ondas ($Re_{*,g} = 210$, $u_{*,g} = 0,25$ m/s), uma superfície com pequenas ondulações ($Re_{*,g} = 86$, $u_{*,g} = 0,1$ m/s) e uma superfície plana ($Re_{*,g} = 43$, $u_{*,g} = 0,05$ m/s). Percebeu-se que a variação da velocidade de fricção da fase gasosa tem influência predominante nas configurações da interface líquido-gás como discutido em Turney et al. (2005), sendo a velocidade de fricção de 0,1 m/s um valor limítrofe para a formação de ondas na interface.

A simulação utilizando LES mostrou resultados bastante satisfatórios em relação aos resultados de DNS do estudo de Komori et al. (2010). Simulações utilizando DNS são amplamente encontradas na literatura científica para estudos de escoamento multifásico. O mesmo não é visto em relação a modelagem LES o que torna o presente trabalho bastante importante para uma aplicação do problema proposto.

A interface possui comportamento distinto em relação as fases analisadas. Para a fase gasosa ela se comporta como uma superfície sem deslizamento, com alta tensão de cisalhamento associada a presença de vórtices turbulentos como em região de parede. Por outro lado, a fase líquida, não mostra o mesmo comportamento. As estruturas turbulentas para o escoamento em tanque são geradas a partir da interface, e na simulação com presença de ondas, as estruturas coerentes se mostraram em maior quantidade e menos alongadas quando comparada aos demais casos, para ambas as fases.

A transferência de massa mostrou-se controlada pelos processos de explosões turbulentas, varreduras e ejeções próximas a interface com presença de vórtices em forma de grampo de cabelo e estruturas em forma de cogumelo na fase líquida. Estes processos auxiliam na renovação de superfície trazendo fluido de alta concentração para as proximidades da interface. Os movimentos turbulentos próximos a interface contribuem também para a transferência de massa, pois diminuem a espessura da camada de concentração, aumentando o

gradiente de concentração. Assim, foi possível notar que na presença de ondas desenvolvidas na interface, a transferência de massa é favorecida em relação a superfície com pequenas ondulações ou plana. Em especial, valores elevados de fluxo de massa foram encontrados em regiões da interface líquido-gás em que prevalecem as ondas capilares.

A transferência de massa também foi analisada a partir de diferentes valores da constante de Henry. Valores maiores de k_l são encontrados para compostos odorantes como o sulfeto de hidrogênio cuja transferência de massa é controlada pela fase líquida, seguido da amônia e do ácido valérico, cuja transferência de massa é controlada por ambas as fases e a fase gasosa, respectivamente. O valor do coeficiente global de transferência de massa da fase líquida, K_L , foi bem correlacionado com a constante de Henry, mostrando que em escoamentos multifásicos sua mensuração é possível independente do composto que se queira analisar a transferência de massa.

5.1 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Após a realização do presente trabalho, algumas sugestões podem ser feitas para trabalhos futuros. São elas:

- (i) realizar um estudo mais detalhado de tamanho de geometria aplicado a baixos números de Reynolds, buscando assim, diminuir o custo computacional das simulações;
- (ii) utilizar um método de ajuste de malha ao comportamento da interface, a fim de diminuir o custo computacional de simulação já que não será necessário um refinamento de malha tão detalhado na região de amplitude que as ondas na interface podem atingir;
- (iii) realizar simulações para velocidades de fricção intermediárias as realizadas neste trabalho, como por exemplo, 0,075 m/s e 0,15 m/s, para verificar se a transferência de massa associada a variação do número de Reynolds pode ser representada por uma curva, para superfície deformáveis com a presença de ondulações na interface.
- (iv) estudar a influência do coeficiente de difusão na transferência de massa a partir de valores de número de Schmidt diferentes de uma unidade.

(v) avaliar a influência da constante de Henry associada aos demais números de Reynolds (86 e 43) na transferência de massa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Ansys Inc. CFX-14.5 user's guide; 2013.

ABE, H.; KAWAMURA, H.; MATSUO, Y.. Direct Numerical Simulation of a Fully Developed Turbulent Channel Flow With Respect to the Reynolds Number Dependence. **Journal of Fluids Engineering**, v. 123, P. 382- 393.

ARANTES, E. J.. **Caracterização do escoamento sobre vertedouros em degraus via CFD**. Tese de doutorado, Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.

AROGO, J.; ZHANG, R. H.; RISKOWSKI, G. L.; CHRISTIANSON, L. L.; DAY, D. L.. Mass transfer coefficient of ammonia in liquid swine manure and aqueous solutions. **Journal of Agricultural Engineering Research**, v. 73, p. 77-86, 1999b.

ARYA, S. P.. **Introduction to Micrometeorology**. San Diego, Academic-Press, 1988.

BANERJEE, S.. Direct Numerical Simulation of Turbulence and Scalar Exchange at Gas-Liquid Interfaces. **Direct and Large-Eddy Simulation VI, Part I**, p. 3-16, 2006.

BANERJEE S.; MACINTYRE S.. The air-water interface: Turbulence and scalar exchange. Advances in coastal and ocean engineering. **Transport at the Air-Sea Interface: Measurements, Models and Parametrizations**, Ed. Springer, 1ª edição, 2004.

BLUNDEN, J.; ANEJA, V. P.. Characterizing ammonia and hydrogen sulfide emissions from a swine waste treatment lagoon in North Carolina. **Atmospheric Environment**, v. 42, n.14, p. 3277–3290, 2008.

BRACKBILL, J.U.; KOTHE, D.B.; ZEMACH, C.. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, n. 2, pp. 335-354, 1992.

BRENNEN, C. E. **Fundamentals of Multiphase Flow**. Cambridge University Press, Cambridge, 2005

CALMET, I.; MAGNAUDET, J.. Large-eddy simulation of high-Schmidt number mass transfer in a turbulent channel flow. **Phys. Fluids**, v. 9, n. 2, p. 438-455, 1997.

ÇENGEL, Y. A.; GHAJAR, A. J.. **Transferência de Calor e Massa - Uma Abordagem Prática**. Ed. MCGRAW-HILL BRASIL, 4ª edição, 2012.

CHAO, H. P.. A new approach for estimating emissions of organic solutes and organic solvents under wind speeds. **Atmospheric Environment**, v. 43, p. 2045–2051, 2009.

CHAO, H.; LEE, J.; LEE, C.; HUANG, H.. An alternative method for predicting organic solute volatilization rates under gas and liquid turbulence. **Chemosphere**, v. 59, p. 711-720, 2005.

COHEN, Y.; COCCHIO, W.; MACKAY D.. Laboratory study of liquid-phase controlled volatilization rates in presence of wind waves. **Environmental Science & Technology**, v. 12, p. 553-558, 1978.

CREMASCO, M. A.. **Fundamentos de Transferência de Massa**, Ed. UNICAMP, São Paulo, 2ª Edição, 2009.

CUESTA, I.; GRAU, F.X.; GIRALT, F.; COHEN, Y.. Air-water mass transfer of organics from shallow ponds under laminar recirculation. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 42, p. 165-179, 1999.

DANCKWERTS. P. V. .Significance of liquid-film coefficients in gas absorption. **Indust. And Eng. Chem.**, v. 43, p 1460-1467, 1951.

DAVIDSON, P. A.. **Turbulence: an introduction for scientists and engineers**. Oxford University Press, 2009.

DE ANGELIS, V.; LOMBARDI, P.; e BANERJEE. S.. Direct numerical simulation of turbulent flow over a wavy wall. **Phys. Fluids**, v. 9, n.8, p. 2429 - 2442, 1997.

DE ANGELIS, V., LOMBARDI, P., ANDREUSSI, P., BANERJEE, S.. **Microphysics of scalar transfer at air-water interfaces**. Wind-over-wave couplings: Perspectives and prospects. Oxford Univ Press, 1999.

DESOUTTER, G.; HABCHI, C.; CUENOT, B.; POINSOT, T. DNS and modeling of the turbulent boundary layer over an evaporating liquid film. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 52, p. 6028–6041, 2009.

DONG, Y.H.; LU, X.Y.; ZHUANG, L.X. Large Eddy Simulation of turbulent channel flow with mass transfer at high-Schmidt numbers. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.46, p. 1529-1539, 2003.

DREW, D. A.; PASSMAN, S. L.. **Theory of Multicomponent Fluids**. Ed. Springer, New York , V. 135, 1998.

DURÁN, A. L.; JIMENEZ, J.. Effect of the computational domain on direct simulations of turbulent channels up to $Re\tau = 4200$. **PHYSICS OF FLUIDS**, v. 26, p. 011702-1 - 011702-7, 2014.

ENVIROMEGA, 2003. **Toxchem+ software for modeling fate of toxics in wastewater**. Version 3.21. Enviromega, Inc. Dundas Ontario, Canada. Disponível em: <http://www.mpassociates.gr/software/environment/toxplus3.html>. Acesso em: 10 de maio de 2013.

FANG, L.C., NICOLAOU, D., CLEAVER, J.W. Transient removal of a contaminated fluid from a cavity. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 20, n. 6, p. 605-613, 1999.

FERONI, R. C.; SANTO, J. M.; REIS JR, N. C. Volatilization of hydrogen sulfide from a quiescent surface. **Water Science and Technology**, v. 66.9, p. 1991-1996, 2012.

FRÖHLICH, J.; CHRISTOPHER, P. M.; RODI, W.; TEMMERMAN, L.; LESCHZINER, M.. Highly resolved large-eddy simulation of separated flow in a channel with streamwise periodic constrictions. **J. Fluid Mech**, v. 526, p. 19-66, 2005

FULGOSI, M.; LAKEHAL, D.; BANERJEE, S.; ANGELIS, V. Direct numerical simulation of turbulence in a sheared air–water flow with a deformable interface. **J. Fluid Mech.**, v. 482, p. 319–345, 2003.

GARCÍA, J. M.; GARCÍA, F.. Efecto de la Viscosidad y de la Densidad de Mezcla en el Gradiente de Presión de Flujo Homogéneo Gas-Líquido en Tuberías Horizontales, **Información Tecnológica**, v. 20, n. 4, p. 95-106, 2009.

GODDERIDGE, B.; TURNOCK, S.; TAN, M.; EARL, C.. An investigation of multiphase CFD modelling of a lateral sloshing tank. **Computers & Fluids**, 38, p. 183-193, 2009.

GERMANO, M.; PIOMELLI, U.; MOIN, P.; CABOT, W. H.; A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. **Phys. Fluids**, v. 3, n. 7, p. 1760-1765, 1991.

GODDERIDGE, B.; TURNOCK, S.; TAN, M.; EARL, C.. An investigation of multiphase CFD modelling of a lateral sloshing tank. *Computers & Fluids*, 38, p. 183-193, 2009.

GOSTELOW, P.; PARSONS, S.; COBB, J. Development of an odorant emission model for sewage treatment works. **Water Science and Technology**, v. 44, n. 9, p. 181-188, 2001.

GREEN, S. I. **Fluid Vortices: Fluid Mechanics and its Applications**. Ed. Kluwer Academic Publishers. 2ª edição, Canadá, 1995.

GUALTIERI, C.; DORIA, P. D.. **Gas-transfer at unsheared free-surfaces**. Fluid Mechanics of Environmental Interfaces, Ed. Taylor and Francis Group, 2ª edição, 2008.

HANSCH, S., LUCAS, D., HOHNE, T., KREPPER, E., MONTOYA, G.. Comparative simulations of free surface flows using VOF-methods and a new approach for multi-scale interfacial structures. FEDSM2013,

HAROUN, Y.; LEGENDRE, D.; RAYNAL, L. Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: Application to stable liquid film. **Chemical Engineering Science**, v. 65, p. 2896-2909, 2010.

HASEGAWA, Y.; KASAGI, N. Effects of interfacial velocity boundary condition on turbulent mass transfer at high Schmidt numbers. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 28, n. 6, p.1192–1203, 2007.

HASEGAWA, Y.; KASAGI, N. Hybrid DNS/LES of high Schmidt number mass transfer across turbulent air–water interface. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 52, p. 1012-1022, 2009.

HASSANVAND, A.; HASHEMABADI, S. H. Direct numerical simulation of interphase mass transfer in gas–liquid multiphase systems. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 38, p. 943-950, 2011.

HENN, D.; SYKES, R. I.. Large-eddy simulation of flow over wavy surfaces. **J. Fluid Mech**, v. 383, p. 75-112, 1999.

HERLINA and G.H. JIRKA, Experiments on gas transfer at the air-water interface induced by oscillating grid turbulence. **J. Fluid Mech** v. 594, p. 183 - 208, 2008.

IIDA, O.; NAGANO, Y.. The Relaminarization Mechanisms of Turbulent Channel Flow at Low Reynolds Numbers. **Flow, Turbulence and Combustion**, v. 60, p. 193-213, 1998.

ISHII, M.; HIBIKI, T.. Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase. Segunda Edição. Editora Springer, 2011.

HANSCH, S.; LUCAS, D.; HOHNE, T.; KREPPER, E.; MONTOYA, G.. Comparative simulations of free surface flows using vof-methods and a new approach for multi-scale interfacial structures. **Proceedings of the ASME 2013 Fluids Engineering Division Summer Meeting**, Incline Village, Nevada, USA, 2013.

HASSANVAND, A.; HASHEMABADI, S. H. Direct numerical simulation of interphase mass transfer in gas-liquid multiphase systems. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 38, p. 943-950, 2011.

HIGBIE, R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. **AIChE**, v. 31, p. 365-388, 1935.

HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D.. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 39, p. 201 - 225, 1981.

HUDSON, N.; AYOKO, G. Odour sampling 1: Physical chemistry considerations. **Bioresource Technology** , v. 99, n. 10, p. 3982-3992, 2008.

HWANG, Y.; COSSU, C.. Self-sustained processes in the logarithmic layer of turbulent channel flows. **Physics of Fluids**, v. 23, n. 6, p. 2011

HWANG, Y.. Near-wall turbulent fluctuations in the absence of wide outer motions. **J. Fluid Mech**, v. 723, p. 264 - 288, 2013.

ISHII, M.; HIBIKI, T.. **Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase**. Ed. Springer. 2ª Edição, 2011.

JIRKA, H.; HERLINA, H.; NIEPELT, A.. Gas transfer at the air-water interface: experiments with different turbulence forcing mechanisms. **Exp Fluids**, v. 49, p. 319 - 327, 2010.

JOSHI, J. B.; RANADE, V. V. Computational fluid dynamics for designing process equipment: expectations, current status and path forward. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 42, p. 1115-1128, 2003.

KAZI, S. N.. **An Overview Of Heat Transfer Phenomena**, Ed. InTech, 2ª edição, 2012

KIM, J.; PARVIZ, M.; MOSER, R.. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. **J. Fluid Mech**, v. 177, p. 133 - 166, 1987.

KOLMOGOROV, A. N. The local structure of turbulence incompressible. **Dokl. Akad. Nauk. USSR** , v. 30, p. 9-13, 1941.

KOMORI, S., KUROSE, R., IWANO, K., UKAI, T. and SUZUKI, N.. Direct numerical simulation of wind-driven turbulence and scalar transfer at sheared gas–liquid interfaces. **Journal of Turbulence**, Vol. 11, n. 32, p. 1-20, 2010.

KOMORI, S.. **Turbulent gas transfer across air-water interfaces**. Handbook of Environmental Fluid Dynamics, Volume One: Overview and Fundamentals, Ed. CRC Press, 1ª edição, 2012.

KRISHNA, R., STANDART, G. L.. A multicomponent film model incorporating a general matrix method of solution to the Maxwell-Stefan equations. *AIChE Journal*, v. 22, n. 2, p. 383-389, 1976.

KUMAR, S.; GUPTA, R.; BANERJEE, S.. An experimental investigation of the characteristics of free-surface turbulence in channel flow. **Physics of Fluids**, v. 10, n. 2, p. 437 - 456, 1997.

LAKEHAL, D.; MEIER, M.; FULGOSI, M.. Interface tracking towards the direct simulation of heat and mass transfer in multiphase flows. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 23, p. 242-257, 2002.

LAKEHAL, D.; FULGOSI, M.; YADIGAROGLU, G.; Banerjee, S.. Direct Numerical Simulation of Turbulent Heat Transfer Across a Mobile, Sheared Gas-Liquid Interface. **Journal of Heat Transfer**, v. 125, p. 1129 - 1139, 2003.

LAM, K.; BANERJEE, S. On the condition of streak formation in a bounded turbulent flow. **Phys. Fluids A** 4, p. 306, 1992.

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

LEWIS, W. K.; WHITMAN, W. G. Principles of gas absorption. **Ind. Eng. Chem**, v. 16, n. 12, p. 1215-1220, 1924

LILLY, D. K. **The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments**. In: Goldstine HH (ed) Proceedings of the IBM scientific computing symposium on environmental sciences, New York, 1967.

LILLY, D. K. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. **Phys. Fluids**, v. 4, n. 3, p. 633-635, 1992.

LIMPT, H.; BEERKENS, R.; LANKHORST, A.; HABRAKEN, A. Mass transfer relations for transpiration evaporation experiments. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 48, p. 4265–4281, 2005.

LIN, M. Y.; MOENG, C. H.; TSAI, W. T.; SULLIVAN, P. P.; BELCHER, S. E.. Direct numerical simulation of wind-wave generation processes. **J. Fluid Mech**, v. 616, p. 1 - 30, 2008.

LIU, S.; KERMANI, A.; SHEN, L.; YUE, D.. Investigation of coupled air-water turbulent boundary layers using direct numerical simulations. **Physics of Fluids**, v. 21, p. 062108-1 - 062108-19, 2009

- LOMBARDI, P.; DE ANGELIS, V.; BANERJEE, S. Direct numerical simulation of near-interface turbulence in coupled gas-liquid flow. **Physics of Fluids**, v. 8, n.6, p. 1643-1665, 1996.
- MACINTYRE, F.; Enhancement of gas transfer by interfacial ripples. **Phys. Fluids**, v. 14, p. 181–184, 1971.
- MACKAY, D.; YEUN, A. T. K. Mass-transfer coefficient correlations for volatilization of organic solutes from water. **Environmental Science & Technology**, v. 17, n. 4, p. 211-217, 1983.
- MACKAY, D.; MATSUGU, R. S. Evaporation rates of liquid hydrocarbon spills on land and water. **Can. J. Chem. Eng.**, v. 51, p. 434, 1973.
- MAGNAUDET, J.; CALMET, I. Turbulent mass transfer through a flat shear-free surface. **J. Fluid Mech.**, v. 553, p. 155–185, 2006.
- MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**, Ed. LTC, Rio de Janeiro, 2004.
- MATHPATI, C. S.; JOSHI, J. B. Insight into Theories of Heat and Mass Transfer at the Solid-Fluid Interface Using Direct Numerical Simulation and Large Eddy Simulation. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 46, p. 8525-8557, 2007.
- MOIN, P.; KIM, J.. Numerical Investigation of Turbulent Channel Flow. **J. Fluid Mech**, v. 118, 1982.
- MOSER, R.; KIM, J.; NAGI, N. M.. **Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to Ret 590**. **Physics of Fluids**, v. 11, n. 4, p. 943 - 945, 1999
- MURAKAMI, S. Current Status and Future Trends in Computational Wind Engineering. **Journal of Wind Eng. and Ind. Aero.**, v.67 e 68, p. 3-34, 1997.
- NAGAOSA, R. Direct numerical simulation of vortex structures and turbulent scalar transfer across a free surface in a fully developed turbulence. **Phys. Fluids**, v.11, n. 6, p. 1581-1595, 1999
- NORILER, D. et al. Computational fluid dynamic applied to diffusional separation process. In: *16th International Congress of Chemical and Process Engineering*. Prague, Czech Republic: [s.n.], 2004.
- OLIVEIRA, G. C.; JUSTI, G.H.; LOPES, G.C; GONÇALVES, J.A.S.. Estudo da transferência de massa de um prato perfurado industrial na destilação do etanol através de cfd. **XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Florianópolis**, 2014.
- PATANKAR, S. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing Corporation. Second Edition. USA, 1980.
- PALADINO, E. E.. **Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do tipo Pressão diferencial**. Tese de doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 2005.

PATEL, V. C., CHON, J. T., AND YOON, J. Y. Turbulent flow in a channel with a wavy wall. *J. Fluids Engine.* **113** (1991), 579–586

PEIRSON, W.; WALKER, J. W.; BANNER, M. L.. On the microphysical behaviour of wind-forced water surfaces and consequent re-aeration. *J. Fluid Mech*, v. 743, p. 399-477, 2014.

PENG, J.; JATINDER K. BEWTRA.; BISWAS, N. Volatilization of selected organic compounds from quiescent water. *Journal of Environmental Engineering*, v. 120, n. 3, 1994.

PERRY, A.E., LIM, T.T.; TEH, E.W. A visual study of turbulent spots. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 104 , p. 387 - 405, 1981.

POPE, S. B.. **Turbulent Flows**. Ed. Cambridge University Press, v. 1ª edição, 2000

RASHIDI, M.; BANERJEE, S. Turbulence structure in free-surface channel flows, *Phys. Fluids*, v. 31, n.9, p.2491-2503, 1988.

RASHIDI, M.; BANERJEE, S.. The effect of boundary conditions and shear rate on streak formation and breakdown in turbulent channel flows. *Physics of Fluids*, v. 2, n. 10, p. 1827-1838, 1990.

RASHIDI, M.. Burst–interface interactions in free surface turbulent flows. *Phys. Fluids*, v. 9, n. 11, p. 3485 - 3501, 1997

REBOUX, S.; SAGAUT, P.; LAKEHAL, D. Large-eddy simulation of sheared interfacial flow. *Physics of Fluids*, v. 18, p. 105-115, 2006.

Rhie, C. M. & Chow, W. L., (1983), A numerical study of the turbulent flow past an isolated airfoil with trailing edge separation, *AIAA Journal*, v. 21, p. 1525- 1532.

Rosa, E. S.. **Escoamento Multifásico Isotérmico: Modelos de Multifluidos e de Mistura**. Ed. Bookman, 1ª edição, Porto Alegre, 2012.

SANDER, R.. **Compilation of Henry’s law constants for inorganic and organic species of potential importance in environmental chemistry**. Air Chemistry Department, Max-Planck Institute of Chemistry, Germany. 1999. Disponível em: <http://www.mpch-mainz.mpg.de/~sander/res/henry.html>. Acesso em: 20 de junho de 2010.

SANTOS, M. J.; KREIM, V.G.; JEAN. M.; REIS JR, N. R., SÁ, L. M. JOHN, N. An experimental determination of the H₂S overall mass transfer coefficient from quiescent surfaces at wastewater treatment plants. *Atmospheric Environment*, v. 60, p. 18-24, 2012.

SCHWARZENBACH, R.; GSCHWEND, P.; IMBODEN, D. **Environmental Organic Chemistry**, second ed. John Wiley & Sons, New York, 2003.

Shuangfeng, W.,; FU, J.; ZHENNAN, N.; WU, Z.. An experimental study on turbulent coherent structures near a sheared air-water interface. *Chinese Journal of Mechanics Press*, v. 15, n. 4, p. 289 - 298, 1999.

SILVEIRA NETO, A. **Fundamentos da Turbulência nos fluidos, Turbulência**. Editores: Freire, A.P.S.; Menut, P.P.M.; Su, J.. Cap. 1, ABCM, Rio de Janeiro, 2002.

SMAGORINSKY, J. General Circulation Experiments with Primitive Equations. **Mon. Weather Rev.**, v. 91, p. 99-164, 1963.

SOARES, C.; NORILER, D.; MACIEL, M. R. W.; BARROS, A. A. C.; MEIER, H. F.. Verification and validation in cfd for a free-surface gas-liquid flow in channels. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 30, n. 2, p. 323 - 335, 2013.

SUGA, K.; KUBO, M. Modelling turbulent high Schmidt number mass transfer across undeformable gas-liquid interfaces. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. v. 53, p. 2989-2995, 2011.

SUSSMAN, M.; SMEREKA, P.; OSHER, S. A level set approach for computing solutions of incompressible two-phase flow. **Journal of Computational Physics**, v. 114, p. 146_159, 1994.

STUETZ, R.; FRENCHEN, F. B. **Odours in Wastewater Treatment**. Cornwall (UK): IWA Publishing, p.437, 2001.

TAKAGAKI, N.; KUROSE, R.; TSUJIMOTO, Y.; KOMORI, S.; TAKAHASHI, K.. Effects of turbulent eddies and Langmuir circulations on scalar transfer in a sheared wind-driven liquid flow. **Physics of Fluids**, v. 27, p. 016603-1 - 016603-19, 2015.

TELEKEN, J. G.. **Análise da fluidodinâmica do prato perfurado de uma unidade piloto de destilação**. Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina, 2009.

THEOFANOUS, T. G.; HOUZE, R. N.; BRUMFIELD, L. K.. Turbulent mass transfer at free, gas-liquid interfaces, with applications to open-channel, bubble and jet flows. **Int. J. Heat Mass Transfer**, v. 19, p. 613 - 624, 1976.

TOWNSEND, A. A.. **The Structure of Turbulent Shear Flow**. Ed. Cambridge University Press. 2ª edição, Cambridge, 1999.

TRAPP, S.; HARLAND, B. Field test of volatilization models. **Environmental Science and Pollution Research**, v. 2, n. 3, p. 164-169, 1995.

TSUKAHARA, T.; SEKI, Y.; KAWAMURA, H.; TOCHIO, D.. DNS of Turbulent Channel Flow with Very Low Reynolds Numbers. **Computational mechanics wccm vi in conjunction with apcom'04**, Beijing, China, 2004.

TSUKAHARA, T.; KAWAMURA, H.; SHINGAI, K.. DNS of turbulent Couette flow with emphasis on the large-scale structure in the core region. **Journal of Turbulence**, v. 7, n. 19, 2006.

TSUKAHARA, T.; SEKI, Y.; KAWAMURA, H.; TOCHIO, D.. DNS of turbulent channel flow at very low Reynolds numbers. *Physics Fluid Dynamics*, v. 2, p. 1 - 18, 2014.

TURNEY, D. E.; SMITH, W. C.; BANERJEE, S.. A measure of near-surface fluid motions that predicts air-water gas transfer in a wide range of conditions. **Geophysical Research Letters**, v. 32, p. 1 - 4, 2005.

TURNEY, D.; BANERJEE, S. Near surface turbulence and its relationship to air–water gas transfer rates. **The 6th International Symposium on Gas Transfer at Water Surfaces**, Kyoto, Japão, 2010.

USEPA, 1994. Air Emission Models for Waste and Wastewater. EPA-453/R-94e080A. North Carolina Research Triangle Park. Disponível em:
<http://www.epa.gov/ttn/chief/software/water/>. Acesso em: 27 de fevereiro de 2013.

Venditti, J. G.; BEST, J. L.; CHURCH, M.; HARDY, R. J.. **Coherent Flow Structures at Earth's Surface**. Ed. Wiley Blackwell. 1ª edição, 2013.

VIAZZO, S.; DEJOAN, A.; SCHIESTEL, R.. Spectral features of the wall-pressure fluctuations in turbulent wall Flows with and without perturbations using LES. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, v. 22, p. 39 - 52, 2001.

WHITMAN W. G. A preliminary experimental confirmation of the two-film theory of gas adsorption. **Chem. Metall. Eng.** v. 29, p. 146, 1923.

WHITE, F. M., 1991. Viscous Fluid Flow 2ª Edição. Nova York, Estados Unidos. McGrawHill.

YEOH, GUAN HENG e TU, JIYUAN. Computational Techniques for Multiphase Flows, 1st Edition. **Editora: ACADEMIC PRESS**. 2009.

ZAPPA, C.; RAYMOND, P. A.; TERRAY, E. A.; MCGILLIS, W. R.. Variation in Surface Turbulence and the Gas Transfer Velocity over a Tidal Cycle in a Macro-tidal Estuary. **Estuaries**, v. 26, n. 6, p 1401 - 1415, 2003.