

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

CENTRO TECNOLÓGICO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

ENILENE REGINA LOVATTE

Estudo da transferência de massa por volatilização de  
compostos odorantes a partir de superfícies líquidas  
quiescentes

VITÓRIA

2015

ENILENE REGINA LOVATTE

Estudo da transferência de massa por volatilização de  
compostos odorantes a partir de superfícies líquidas  
quiescentes

Tese apresentada ao Programa da Pós-Graduação em Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

Orientador: Neyval Costa Reis Junior

Coorientador: Bruno Furieri

**VITÓRIA**

**2015**

Dados Internacionais de Catalogação-na-publicação (CIP)

(Biblioteca Central da Universidade Federal do Espírito Santo, ES, Brasil)

---

Lovatte, Enilene Regina, 1965

L367m Estudo da transferência de massa por volatilização de compostos odorantes a partir de superfícies líquidas quiescentes

Enilene Regina Lovatte – 2015.

133 f.

Orientador: Neyval Costa Reis Júnior

Coorientador: Bruno Furieri

Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) –

Universidade Federal do Espírito Santo, Centro Tecnológico.

1. Massa - Transferência. 2. Volatilização. 3. Odores. 4. Superfície quiescente. 5. LES. I. Reis Jr., Neyval Costa. II. Furieri, Bruno, III. Universidade Federal do Espírito Santo. Centro Tecnológico. III. Título.

CDU:

---

## **MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA**

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

---

Prof. Dr. Bruno Furieri  
Coorientador - DEA/CT/UFES

---

Prof.<sup>a</sup> Dra. Jane Meri Santos  
Examinador interno - DEA/CT/UFES

---

Prof.Dr. Davidson Martins Moreira  
Examinador interno – DEA/CT/UFES

---

Prof. Dra. Angela Ourivio Nieckele  
Examinador externo – PUC-Rio

---

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

---

## AGRADECIMENTOS

À Deus por todas as bênçãos e conquistas da minha vida. Aos meus santos e anjos protetores. Santo Antônio e Nossa Senhora da Penha.

Ao meu marido Hans-Jörg que me incentivou e esteve sempre ao meu lado, “de braços abertos com todo o amor e carinho”. A pessoa maravilhosa que Deus colocou na minha vida durante tantos anos que me faz rir sempre e viver cada dia melhor.

Ao meu filho Nicolas pela “incansável e indispensável barbatana da sorte” de todos os dias. Meu “bebê” cresceu e virou um rapaz lindo durante este período.

À minha mãe Enilma, para quem o doutorado representou um período de “proximidade distante” que sinceramente espero recuperar. Ao meu irmão Hudson e sobrinho André que sempre estiveram na torcida.

Ao meu sogro Hans Max e minha sogra Ruth, por serem minha família querida, pelo filho maravilhoso e pelos divertidos almoços de todos os domingos.

Ao grande amigo Bruno Furieri pelo apoio de todo dia, por todos os conhecimentos de vida e profissionais compartilhados. Qualquer agradecimento é pouco perto do que ele representou na realização deste trabalho. Um anjo que Deus colocou no meu caminho e que me ensinou, entre outras coisas, que ter fé nunca é demais.

À toda a minha família, em especial, a minha prima Marcylene que ouviu minhas histórias todas as sextas feiras durante quase todo doutorado. À minha tia Cida pelo exemplo de fé, perseverança, trabalho e por não desistir nunca.

Ao professor Neyval pela orientação competente, pela presença constante, pela oportunidade de realização deste trabalho e pelo entusiasmo demonstrado pelo assunto.

À professora Jane pela ótima acolhida em sua sala, pela motivação sempre oportuna e pelo conhecimento compartilhado. Só quem é professor sabe o quanto isso pode significar na condução de um trabalho.

Aos amigos de coordenação do IFES pelo apoio e oportunidade de cursar o doutorado com afastamento, em especial a amiga Marisa.

Aos amigos de sala, Edilson, Milena, Maria Clara e Israel pelo companheirismo e incentivo de todos os dias. Ao amigo Harerton que não poupou esforços na intenção de ajudar na instalação da rede. Ao Elson pelo importante apoio na instalação do cluster e a Elisa que se dispôs a apresentar em congresso o 1º artigo desta tese. Aos amigos do programa pela jornada divertida e cheia de prazer. Ademir, Alexandre, Antonio, Ayres, Carlos Dutra, Camila, Erica, Fernanda, Israel, José, Lya, Nadir, Rafael, Rizzieri e Rita. Pessoas maravilhosas que certamente deveria ter conhecido nessa vida.

Ao pessoal do NPD, em especial ao Luiz Otávio pelo apoio nas questões relacionadas à rede. Agradeço também ao pessoal da prefeitura universitária, em especial, ao Ricardo pelo apoio na manutenção do ar condicionado.

À FAPES, CAPES, CNPQ e FINEP pelos recursos disponibilizados.

Aos membros da banca por aceitarem examinar com atenção o conteúdo, contribuindo para melhoria das análises apresentadas nesta tese: Profª. Drª. Angela Nieckele, Prof. Dr. Antonio Goulart, Prof. Dr. Davidson Moreira e Profª. Drª. Jane Meri Santos.

À Universidade Federal do Espírito Santo – UFES e aos professores Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental – PPGEA pela oportunidade de cursar o Doutorado. À secretária do PPGEA, Rose, pelo constante apoio, dedicação (e orações) e demais colaboradores do Programa e Departamento de Engenharia Ambiental.

Aos professores Angela Nieckele, Antonio Frasson, Aristeu Neto, Davidson Moreira, Fernando Menandro, Eudes Arantes, Ilias Mavroidis, João Marcelo Vedevoto, Jean-Luc Harion, Renato Pacheco, Rogério Ramos e Taciana Albuquerque pela disposição em ajudar sempre.

Ao professor e amigo Carlos Friederic Loeffler pelo incentivo e torcida desde a orientação do mestrado, a quem devo o desejo de fazer o doutorado. A amiga Zezé, vizinha de porta e torcedora incondicional desde o mestrado.

Ao amor da minha vida Hans-Jörg

Ao nosso amado filho Nicolas

“Grandes coisas fez o Senhor por nós, por isso estamos alegres”

Salmo 126-3

## Resumo

O presente trabalho tem por objetivo estudar as estruturas do escoamento turbulento na água próximo à interface líquido-gás com deformação negligenciável e seus efeitos na transferência de compostos. A simulação das grandes escalas (LES) com modelagem dinâmica de submalha foi utilizada para a representação da turbulência usando o código FLUENT. O fluido foi considerado newtoniano, incompressível e isotérmico. O modelo matemático foi validado com dados de simulação numérica direta (DNS) da literatura. Foram realizadas simulações com números de Reynolds baseados na velocidade de fricção iguais a 150, 640 e 1280 e com números de Schmidt iguais a 1, 200 e 580 permitindo assim investigações específicas dos efeitos desses parâmetros governantes. Os resultados de validação mostraram que a metodologia é adequada na compreensão do transporte de escalar e na visualização da turbulência (estruturas coerentes). Análises qualitativas da distribuição de vorticidade, divergente de superfície, concentração instantânea de escalar e flutuação de concentração de escalar mostraram a existência de estruturas turbulentas agindo no transporte do escalar. Essas têm aspecto quase longitudinal, existindo de forma contra-rotativa e agindo na formação de movimentos verticais ascendentes e descendentes próximo à interface. A influência do número de Reynolds está principalmente associada à redução da espessura da subcamada difusiva devido ao aumento da mistura da grandeza escalar no seio do escoamento. As estatísticas da turbulência para os diferentes números de Reynolds indicam variações consistentes nos resultados do escoamento e transporte do escalar com a variação desse parâmetro. A espessura da subcamada difusiva próxima à superfície livre diminui fortemente nos casos em que o número de Schmidt aumenta. Com relação ao coeficiente de transferência de massa, entre os casos investigados, o valor máximo foi obtido para o número de Reynolds e o número de Schmidt é 1, enquanto a simulação correspondente ao número de Reynolds igual a 150 e Schmidt igual a 580 resulta no valor mínimo. Os valores intermediários do coeficiente crescem com o aumento de Reynolds e diminuem com o aumento de Schmidt.

Palavras-chave: Transferência de Massa, Volatilização, Compostos Odorantes, Turbulência, LES.

## Abstract

This work aims to study the turbulent flow structures in the water near the gas-liquid interface with negligible deformation and its effects on the transfer of compounds. The Large Eddy Simulation (LES) with dynamical subgrid modelling was used to represent the turbulence using the FLUENT code. The fluid was considered Newtonian, incompressible isothermal. The mathematical model was validated with Direct Numerical Simulation (DNS) data from literature. Numerical simulations were performed with Reynolds number based on the friction velocity equal to 150, 640 and 1280 and Schmidt numbers equal to 1, 200 and 580 thus allowing specific investigation of the effects of these parameters governing the mass transfer phenomenon. The validation results show that the method is appropriate in understanding the transport and turbulence structures visualization (coherent structures) that directly affect the process. Qualitative analysis of the distribution of vorticity surface divergent, scalar instantaneous concentration and scalar concentration fluctuation showed the existence of turbulent structures acting on the carriage of scalar near the free surface. The coherent turbulent structures visualized in the domain have almost longitudinal aspect, existing contra-rotative vortices that act on the formation of vertical upward and downward movements close to the interface. The influence of the Reynolds number is mainly associated with reduced thickness of the diffusive sublayer due to the increase of scalar mixing in the bulk. The turbulence statistics for different Reynolds numbers indicate consistent variations in the results of the flow and transport of the scalar due to the variation of this parameter. The thickness of the diffusive sublayer near the free surface greatly decreases in cases where the Schmidt number increases. With respect to mass transfer coefficient between the cases investigated, the maximum value was obtained for the Reynolds number and the Schmidt number equal to 1, while the corresponding simulation to the Reynolds number of 150 and Schmidt equal to 580 resulting in minimum. The intermediate values of the coefficient increase with increasing Reynolds and decrease with increasing Schmidt.

Palavras-chave: Mass transfer, Volatilization, Odorant compounds, Turbulence, LES, Quiescent surfaces.

## Lista de Figuras

Figura 2.1 - Relação entre solubilidade e número de Schmidt para diversos compostos Adaptado de Janzen (2006) .....	6
Figura 2.2 – Representação esquemática do canal aberto simulado .....	7
Figura 2.3 - Flutuação da velocidade ao longo do tempo em um ponto do escoamento..	8
Figura 2.4 – Processo de filtragem: escalas resolvidas e escalas modeladas (adaptado de Sagaut 1998). Representação dos espaços (a) físico e (b) Fourier .....	9
Figura 2.5 – Filme líquido e gás. Adaptado de Gostelow et al. (2002).....	11
Figura 2.6 - Relação entre a constante da lei de Henry ( $K_H$ ) e volatilidade - Adaptado de Hudson e Ayoko (2008) .....	16
Figura 3.1 – Fluxograma das atividades realizadas neste estudo .....	19
Figura 4.1 – Representação esquemática do domínio computacional discretizado pelo MVF .....	40
Figura 4.2 – Representação esquemática de domínio discretizado pelo método de volumes finitos em destaque o volume de controle .....	44
Figura 4.3 – Representação esquemática do domínio computacional e condições de contorno.....	47
Figura 4.4 – Refinamento da malha próximo a superfície livre referente à simulação de $Re = 1280$ e $Sc = 580$ .....	49
Figura 4.5 – Localização do ponto de monitoramento N no domínio computacional ...	50
Figura 4.6 – Convergência das estatísticas da variável RMS de flutuação de velocidade longitudinal para os números de Reynolds simulados.....	51
Figura 5.1 – Perfil vertical de velocidade longitudinal média.....	56
Figura 5.2 – Perfis verticais de RMS da flutuação da velocidade nas direções longitudinal, vertical e transversal .....	58
Figura 5.3 – Perfis verticais de RMS da flutuação de vorticidade nas direções longitudinal, vertical e transversal. ....	59

Figura 5.4 – Perfil vertical da componente $u'v'$ do tensor de Reynolds.....	60
Figura 5.5 – Perfil vertical de viscosidade turbulenta normalizada .....	61
Figura 5.6- Perfil vertical do <i>skewness</i> das componentes de velocidade (a) perfil de validação, (b) representação esquemática da função probabilidade de densidade em $y^+ \sim 45$ e (c) representação esquemática da função probabilidade de densidade em $y^+ \sim 150$ .....	62
Figura 5.7- Perfil vertical do <i>flatness</i> das componentes de velocidade (a) perfil de validação, (b) representação esquemática da função probabilidade de densidade em $y^+ \sim 45$ e (c) representação esquemática da função probabilidade de densidade em $y^+ \sim 150$ . ...	63
Figura 5.8 – Perfil vertical de concentração média normalizada .....	64
Figura 5.9 – Perfil vertical do fluxo turbulento do escalar .....	65
Figura 5.10 – Perfil vertical do RMS da flutuação da concentração do escalar.....	65
Figura 5.11 – Distribuição do campo da componente vertical de vorticidade instantânea no plano $xz$ localizado imediatamente abaixo da superfície livre ( $y^+=145$ ) em tempos sucessivos. (a) $t^+ = 1410$ , (b) $t^+ = 1420$ , (c) $t^+ = 1430$ e (d) $t^+ = 1440$ .....	68
Figura 5.12 – Distribuição do tensor de Reynolds instantâneo em plano transversal $yz$ em $x/\delta = 1$ e $t^+ = 3500$ . .....	69
Figura 5.13 – Relação entre (a) os vetores do campo velocidade no plano $xz$ e (b) o divergente de superfície na interface para número de Reynolds igual a 150 e número de Schmidt igual a 1 em $t^+ = 7000$ . Círculos vermelhos indicam $\gamma > 0$ e círculos azuis indicam $\gamma < 0$ . A linha tracejada indica a posição $x/\delta = 0,50$ .....	71
Figura 5.14 – Visualização dos vetores do campo velocidade e da distribuição do campo de flutuação da concentração adimensional em $t^+ = 3500$ no plano $yz$ em $x/\delta = 0,50$ . ....	72
Figura 5.15 - Representação dos vórtices turbulentos pelo critério $Q$ . Os vórtices azuis indicam $\omega x < 0$ e em vermelho $\omega x > 0$ , (a) e (b) detalhes no plano $yz$ e turbulência visualizada pelo critério $Q$ na região próxima à superfície livre. ....	74
Figura 5.16 – Campo de flutuações no plano $xz$ no instante de tempo $t^+ = 3500$ (a) concentração, (b) componente normal da velocidade e (c) componente longitudinal da velocidade.....	77

Figura 5.17 – Visualização da distribuição do campo concentração instantânea em planos transversais localizados a $x/\delta = 1,57$ , $x/\delta = 3,14$ e $x/\delta = 4,71$ (a) $t^+ = 1400$ , (b) $t^+ = 1410$ , (c) $t^+ = 1420$ (d) $t^+ = 3940$ .....	78
Figura 5.18 - Turbulência visualizada pelo critério $Q$ no instante $t^+=7000$ em $y\delta = 1$ para (a) $Re=640$ e (b) $Re= 1280$ .....	81
Figura 5.19 – Relação entre os vetores construídos a partir da flutuação instantânea das componentes das velocidade no plano $xz$ e o divergente de superfície na interface para $Re=640$ e $Sc=1$ em $t^+ = 7000$ (a) vetores do campo velocidade e (b) distribuição do divergente de superfície.....	82
Figura 5.20 – Relação entre os vetores construídos a partir da flutuação instantânea das componentes das velocidade no plano $xz$ e o divergente de superfície na interface para $Re=1280$ e $Sc=1$ em $t^+ = 7000$ (a) vetores do campo velocidade e (b) distribuição do divergente de superfície.....	83
Figura 5.21 – Velocidade média longitudinal para: (a) $Re=150$ , (b) $Re=640$ e (c) $Re=1280$ ; RMS da flutuação de velocidade para: (d) $Re= 150$ , (e) $Re=640$ e (f) $Re=1280$ ; Tensor de Reynolds para (g) $Re=150$ , (h) $Re=640$ e (i) $Re=1280$ ; RMS da flutuação de vorticidade para (j) $Re=150$ , (k) $Re=640$ e (l) $Re=1280$ .....	86
Figura 5.22 – Estatística do transporte de escalar: concentração média para: (a) $Re=150$ , (b) $Re=640$ e (c) $Re=1280$ ; RMS da flutuação de concentração para: (d) $Re=150$ , (e) $Re=640$ e (f) $Re=1280$ ; Fluxo escalar turbulento para: (g) $Re=150$ , (h) $Re=640$ e (i) $Re=1280$ . .....	88
Figura 5.23 – Densidade espectral da velocidade longitudinal em um ponto localizado em $y^+=150$ (a) $Re=150$ (b) $Re=640$ e (c) $Re=1280$ .....	90
Figura 5.24 – Perfis de concentração média para diferentes números de Schmidt (a) $Sc=1$ (b) $Sc=200$ e (c) $Sc=580$ .....	92
Figura 5.25 – Estatística do transporte de escalar: concentração média para (a) $Sc=1$ , (b) $Sc=200$ e (c) $Sc=580$ ; RMS da flutuação de concentração para (d) $Sc=1$ , (e) $Sc=200$ e (f) $Sc=580$ .....	93

Figura 5.26 - Visualização do campo escalar instantâneo para diferentes números de Schmidt e um único número de Reynolds ( $Re=150$ ) em plano $yz$ (a) $Re150Sc1$ , (b) $Re150Sc200$ e (c) $Re150Sc580$ em $t+= 3500$ .....	95
Figura 5.27 – Perfis verticais de concentração média para diferentes números de Reynolds (a) $Re=150$ (b) $Re=640$ e (c) $Re=1280$ .....	97
Figura 5.28 – Coeficiente de transferência de massa para diferentes números de Reynolds: $Re=150$ , $Re=640$ e $Re=1280$ .....	98
Figura 5.29 – Variação do coeficiente de transferência de massa com o número de Schmidt e número de Reynolds .....	99

## Lista de tabelas

Tabela 4.1 – Tempo de processamento total e número de núcleos das simulações realizadas .....	45
Tabela 4.2 – Detalhamento da malha computacional.....	50
Tabela 4.3 – Passos de tempo e tempo de processamento das simulações realizadas ...	52
Tabela 5.1 – Identificação das simulações realizadas .....	55
Tabela 5.2 – Principais parâmetros utilizados nas normalizações.....	79
Tabela 5.3 – Coeficientes de transferência de massa na fase líquida, $k_l$ [m/s] .....	99

## Lista de abreviaturas

- BCD - *Bounded Central Differencing*
- DASM - *Dynamic Anisotropic Selective Model*
- DFFM - *Dynamic Free-Surface Function Model*
- DMM - *Dynamic Mixed Model*
- DNS - *Direct Numerical Simulation*
- DPIV - *Digital Particle Image Velocimetry*
- DSM - *Dynamic Smagorinsky Model*
- DTM - *Dynamic Two Model*
- ETE - Estação de Tratamento de Esgoto
- LDA - *Laser Doppler Anemometry*
- LDV - *Laser Doppler Velocimetry*
- LES - *Large Eddy Simulation*
- LIF - *Laser Induced Fluorescence*
- MPI - *Message Passing Interface*
- MVF - Método dos volumes finitos
- NVD - *Normalized Variable Diagram*
- PIV - *Particle Image Velocimetry*
- RANS - *Reynolds Averaged Navier-Stokes*
- RMS - *Root Mean Square*
- SGS – *Sub Grid Scale*
- SIMPLE - *Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*
- SIMPLEC - *SIMPLE-Consistent*

## Lista de símbolos

### Letras romanas

	Definição	Unidade (SI)
$A_f$	Área da face do volume de controle	$[m^2]$
$C$	Concentração do composto	$[kg\ kg^{-1}]$
$C^+$	Concentração adimensional	$[ ]$
$C_*$	Concentração de fricção	$[ ]$
$C_{Ag,0}$	Concentração do composto no seio - fase gasosa	$[kg\ m^{-3}]$
$C_{Ag,i}$	Concentração do composto na interface - fase gasosa	$[kg\ m^{-3}]$
$C_{Al,0}$	Concentração do composto no seio - fase líquida	$[kg\ m^{-3}]$
$C_{Al,i}$	Concentração do composto na interface - fase líquida	$[kg\ m^{-3}]$
$C_S$	Constante de Smagorinsky	$[m^2\ s^{-2}]$
$C_{\theta i}$	Fluxo cruzado de submalha	$[m\ s^{-1}]$
$c(x, t)$	Coefficiente de submalha Smagorinsky dinâmico	$[ ]$
$D$	Coefficiente de difusão molecular	$[m^2\ s^{-1}]$
$D_g$	Coefficiente de difusão molecular – fase gasosa	$[m^2\ s^{-1}]$
$D_l$	Coefficiente de difusão molecular – fase líquida	$[m^2\ s^{-1}]$
$f_A$	Fluxo de massa que sai do volume de controle	$[kg\ m^{-2}\ s^{-1}]$
$f_B$	Fluxo de massa que entra no volume de controle	$[kg\ m^{-2}\ s^{-1}]$
$F(\phi)$	<i>Flatness</i> (achatamento) de $\phi$	$[ ]$
$g$	Aceleração da gravidade	$[m\ s^{-2}]$
$J_{Al}$	Fluxo de massa da substância A – fase líquida	$[kg\ m^{-2}\ s^{-1}]$
$J_{Ag}$	Fluxo de massa da substância A – fase gasosa	$[kg\ m^{-2}\ s^{-1}]$
$k_c$	Número de onda da escala de Kolmogorov	$[s^{-1}]$
$k_g$	Coefficiente de transferência de massa – fase gasosa	$[m\ s^{-1}]$
$k_l$	Coefficiente de transferência de massa – fase líquida	$[m\ s^{-1}]$
$k_\eta$	Número de onda da escala integral	$[s^{-1}]$
$k_\lambda$	Número de onda de corte	$[s^{-1}]$
$K_G$	Coefficiente global na fase gasosa	$[m\ s^{-1}]$

$K_L$	Coeficiente global na fase líquida	$[\text{ms}^{-1}]$
$K$	Energia cinética turbulenta	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
$K_H$	Constante adimensional da Lei de Henry	[ ]
$l$	Comprimento característico de escala	$[\text{m}]$
$L_{ij}$	Tensor de Leonard	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
$L_{ijG}$	Tensor de Leonard global	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
$L_{\theta i}$	Fluxo de Leonard de submalha	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$L_x$	Dimensão do domínio na direção x	$[\text{m}]$
$L_y$	Dimensão do domínio na direção y	$[\text{m}]$
$L_z$	Dimensão do domínio na direção z	$[\text{m}]$
$\dot{m}_{fn}$	Fluxo de massa que atravessa a face	$[\text{kg} \text{m}^{-2} \text{s}^{-1}]$
$\vec{n}_f$	Número de volumes de controle	[ ]
$p_m$	Pressão mecânica	$[\text{N} \text{m}^{-2}]$
$Q$	Critério $Q$	$[\text{s}^{-1}]$
$q_{\theta i}$	Fluxo turbulento do escalar	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
$\vec{r}$	Vetor direcionado do centro do volume de controle	$[\text{m}]$
$Re$	Número de Reynolds	[ ]
$R_{ij}$	Tensor de Reynolds de submalha	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
$rms \phi'$	RMS da flutuação de $\phi$	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$Sc$	Número de Schmidt	[ ]
$S_{ij}$	Tensor taxa de deformação	$[\text{s}^{-1}]$
$S$	Termo de fonte	$[\text{kg} \text{s}^{-1} \text{m}^{-3}]$
$S(\phi)$	<i>Skewness</i> (assimetria) de $\phi$	[ ]
$T_{ij}$	Tensor das tensões do segundo filtro (teste)	$[\text{m}^2 \text{s}^{-2}]$
$\bar{u}$	Velocidade média na direção longitudinal	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$u_*$	Velocidade de fricção	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$u'_i$	Flutuação de velocidade instantânea na direção $i$	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$u_i^+$	Velocidade adimensional na direção $i$	[ ]
$u_\eta$	Escala de velocidade de Kolmogorov	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$u$	Velocidade na direção x	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$
$\bar{v}$	Velocidade média na direção normal	$[\text{m} \text{s}^{-1}]$

$v$	Velocidade na direção $y$	$[\text{m s}^{-1}]$
$w$	Velocidade na direção $z$	$[\text{m s}^{-1}]$
$\bar{w}$	Velocidade média na direção transversal	$[\text{m s}^{-1}]$
$x$	Direção longitudinal ao escoamento	[ ]
$y$	Direção vertical ao escoamento	[ ]
$y_s^+$	Distância adimensional vertical à superfície livre	[ ]
$y^+$	Distância adimensional vertical à parede	[ ]
$z$	Direção transversal ao escoamento	[ ]

## Letras gregas

	Definição	Unidade (SI)
$\gamma$	Divergente de superfície	$[s^{-1}]$
$\bar{\Delta}$	Largura da malha computacional	[m]
$\Delta x$	Dimensão do elemento na direção x	[m]
$\Delta y$	Dimensão do elemento na direção y	[m]
$\Delta z$	Dimensão do elemento na direção z	[m]
$\nabla\phi_0$	Gradiente da propriedade na face 0	[ ]
$\nabla\phi_1$	Gradiente da propriedade na face 1	[ ]
$\delta$	Altura do canal	[m]
$\varepsilon$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	$[m^2 s^{-3}]$
$\mu$	Viscosidade dinâmica do fluido	$[N s m^{-2}]$
$\eta$	Comprimento de Kolmogorov	[m]
$\nu$	Viscosidade cinemática do fluido	$[m^2 s^{-1}]$
$\nu_{t,SGS}$	Viscosidade turbulenta de submalha	$[m^2 s^{-1}]$
$\rho$	Massa específica	$[kg m^{-3}]$
$\tau_\eta$	Escala de tempo de Kolmogorov	[s]
$\tau_0$	Tensão de cisalhamento	$[N m^{-2}]$
$\bar{\phi}(x, t)$	Função filtrada	[ ]
$\phi_0$	Valor da propriedade na face 0 do volume de controle	[ ]
$\phi_1$	Valor da propriedade na face 1 do volume de controle	[ ]
$\phi_f$	Valor da propriedade discretizada na face do volume	[ ]
$\omega_x$	Componente da vorticidade na direção x	$[s^{-1}]$
$\omega_y$	Componente da vorticidade na direção y	$[s^{-1}]$
$\omega_z$	Componente da vorticidade na direção z	$[s^{-1}]$
$\Omega_{ij}$	Tensor taxa de rotação	$[s^{-1}]$

## Lista de operadores

Operador	Definição
$G$	Função filtro
$\delta_{ij}$	Delta de Kronecker
$\partial$	Derivada parcial
$d$	Derivada total
$\nabla$	Divergente
$\equiv$	Filtro teste
$\text{—}$	Filtro de submalha
$\langle \phi \rangle$	Média de $\phi$

## Índice

Lista de figuras.....	xi
Lista de tabelas.....	xv
Lista de abreviaturas.....	xvi
Lista de símbolos.....	xvii
Lista de operadores.....	xxi
<b>1 Introdução</b> .....	<b>1</b>
<b>2 Fundamentação teórica</b> .....	<b>5</b>
2.1 Visão geral da transferência de massa em canais.....	5
2.2 Turbulência .....	7
2.3 Transferência de massa .....	10
2.3.1 Partição do coeficiente de transferência.....	11
2.4 Parâmetros governantes .....	14
<b>3 Transferência de massa em escoamentos turbulentos</b> .....	<b>17</b>
3.1 DNS de estruturas de vórtices e transferência da grandeza escalar .....	20
3.2 LES de estruturas de vórtices e transferência da grandeza escalar .....	23
3.3 Experimentos de laboratório de estruturas de vórtices e transferência de massa ..	27
<b>4 Metodologia de solução</b> .....	<b>32</b>
4.1 Modelagem Matemática.....	32
4.1.1 Equações de governo.....	32
4.1.2 Modelagem da turbulência.....	33
4.2 Método numérico .....	40
4.2.1 Método de volumes finitos.....	41
4.2.2 Processamento paralelo.....	44

4.3	Descrição das configurações estudadas .....	45
4.3.1	Domínio computacional e condições de contorno .....	45
4.3.2	Malha computacional .....	47
4.4	Critérios de convergência estatística .....	50
<b>5</b>	<b>Resultados e discussões .....</b>	<b>53</b>
5.1	Detalhamento das simulações realizadas .....	53
5.2	Validação da modelagem matemática.....	55
5.3	Simulação numérica do caso base.....	66
5.3.1	Descrição e análise das estruturas turbulentas do escoamento .....	66
5.3.2	Relação entre divergente de superfície e fluxo da grandeza escalar .....	69
5.3.3	Relação entre as estruturas turbulentas do escoamento e o transporte da grandeza escalar .....	75
5.4	Análise da influência dos parâmetros governantes .....	79
5.4.1	Influência do número de Reynolds no escoamento e no transporte escalar.....	80
5.4.2	Influência do número de Schmidt no escoamento e no transporte escalar .....	91
5.4.3	Análise da influência dos parâmetros governantes na transferência de massa .....	96
<b>6</b>	<b>Conclusões e recomendações para trabalhos futuros.....</b>	<b>101</b>
6.1	Recomendações para trabalhos futuros.....	104
	<b>Bibliografia.....</b>	<b>105</b>

# 1 Introdução

A transferência de massa de gases pouco solúveis através de interfaces líquido-gás é importante para uma ampla variedade de aplicações, como a emissão de compostos odorantes em estações de tratamento de esgoto (Hudson e Ayoko, 2008; Blunden et al., 2008; Santos et al., 2012), o lançamento acidental de líquidos no solo (Chao et al., 2005) e a quantificação da absorção de CO<sub>2</sub> e metano pelos oceanos (Jahne e Haußecker, 1998; Turney et al., 2005; Magnaudet e Calmet, 2006; Hasegawa e Kasagi, 2009) que tem relação direta com o entendimento dos processos envolvidos no aquecimento global ou “efeito estufa”.

Superfícies livres quiescentes (caracterizadas pelo baixo grau de agitação superficial) são frequentemente encontradas em estações de tratamento, por exemplo, em tanques de sedimentação e lagoas de estabilização. Diversos gases odorantes de interesse ambiental, tais como o H<sub>2</sub>S encontram-se dissolvidos nas águas residuais destas unidades. Para estimar a emissão desses gases dissolvidos podem ser usados experimentos de campo e modelos algébricos. Esses modelos estimam a taxa de emissão dos gases da fase líquida para fase gasosa, consistem do balanço de massa do gás de interesse na fase líquida e incluem vários mecanismos de remoção do gás da fase líquida, sendo a volatilização o principal deles.

Na interface líquido-gás é formada uma fina camada onde a turbulência é reduzida e os processos de difusão predominam. As espessuras de cada lado da interface dependem da geometria, propriedades físicas dos fluidos e das características do escoamento nas fases líquida e gasosa. A medição experimental dessa camada é de difícil execução e os experimentos de campo tem alto custo e aplicação limitada. Em contraste, os experimentos numéricos têm boa aplicação prática e custo relativamente baixo.

A simulação computacional consiste na solução das equações da conservação de massa, da quantidade de movimento e da espécie química, permitindo determinar os campos de velocidade, pressão e concentração do escoamento. Em escoamentos turbulentos, é obtida uma evolução estatística, ao invés de resolver o campo de escoamento instantâneo. As metodologias mais usuais na modelagem matemática de escoamentos turbulentos são: a simulação numérica

direta (DNS- *Direct Numerical Simulation*), as equações médias de Reynolds (RANS- *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) e as simulações das grandes escalas (LES- *Large Eddy Simulation*).

A simulação numérica direta resolve todo o espectro de energia associado ao escoamento, desde as grandes escalas até as escalas de Kolmogorov, que são as escalas de dimensão, tempo e velocidade dos menores vórtices encontrados em um escoamento. O ideal é simular o escoamento usando DNS porque todo o fenômeno pode ser visualizado.

Por causa da alta precisão da DNS, muitos autores têm utilizado esta técnica para o estudo da volatilização de gases na interface gás-líquido, entre outros, Nagaosa (1999), Fulgosi et al. (2003) e Hasegawa e Kasagi (2009). Entretanto, o elevado custo computacional limita as faixas dos parâmetros físicos investigados. A combinação de uma alta resolução espacial (grande número de pontos de malha) e um passo de tempo pequeno leva a custos computacionais de DNS muito altos, mesmo em baixos números de Reynolds.

Se por um lado, DNS resolve todas as escalas da turbulência, por outro, os modelos das equações médias de Navier-Stokes fornecem apenas informações sobre as quantidades médias das variáveis importantes que descrevem o escoamento, não fornecendo detalhamento adequado (Jiang e Lai, 2009), porém demanda menor esforço computacional.

Como metodologia intermediária entre DNS e RANS, LES tem se mostrado adequada à solução de problemas de transferência de massa de gases, porque permite resolver escoamentos com números de Reynolds e Schmidt compatíveis com aplicações práticas. Isto é possível porque somente as grandes escalas do escoamento são simuladas, sendo as pequenas escalas modeladas.

As grandes escalas do escoamento dominam as transferências de massa e energia. As pequenas escalas são importantes na geração/dissipação das grandes escalas. A estrutura dos grandes vórtices é fortemente dependente da geometria e da natureza do escoamento, sendo os menores vórtices universais. Dentro da metodologia LES, a influência das menores escalas nas grandes escalas é modelada utilizando um modelo de submalha.

O uso de DNS (Direct Numerical Simulation) para o estudo da transferência de massa na interface líquido-gás tem sido significativamente encontrado na literatura científica, entre outros Lombardi et al. (1996), Nagaosa (1999), Fulgosi et al. (2003) e Komori et al. (2010).

Estes estudos mostraram importantes detalhes dos campos de velocidade e concentração próximos à interface e mostraram, ainda, uma conexão direta do campo de concentração com os vórtices ejetados da superfície. Entretanto, a principal limitação destes estudos está relacionada ao esforço computacional necessário para DNS, que limita o valor de  $Re$  das simulações efetuadas. Nestes estudos o valor de  $Re$ , calculado usando a velocidade de fricção e a espessura da camada limite está entre 150 e 200. Segundo Magnaudet e Calmet (2006), este fato faz com que a estrutura do escoamento e campos escalares próximos à superfície apresentem características específicas de escoamentos com baixo  $Re$ , impedindo algumas conclusões mais gerais e de aplicação mais direta a problemas reais, visto que simulações de situações de real interesse prático devem ser realizadas para  $Re$  da ordem de  $10^3$ .

Deste modo, alguns autores têm empregado LES para simular o problema visando alcançar valores de  $Re$  mais próximos às situações práticas, entre outros Dong et al. (2003), Calmet e Magnaudet (2003) e Magnaudet e Calmet (2006), que investigaram o problema com simulações para valores de  $Re$  mais elevados. Entretanto, simulações LES anteriores que exploraram o efeito das variações de  $Re$  com valores mais elevados, mantiveram valores de  $Sc$  próximos a 1, enquanto que simulações que exploraram  $Re$  mais elevados, mantiveram valores de  $Sc$  abaixo de 200, que ainda estão abaixo dos valores de compostos com maior interesse prático como  $CO_2$  ou  $H_2S$ . Além disso, essas simulações não exploraram os efeitos das variações de  $Re$  sobre a transferência de massa. Tais estudos estão limitados a simulações DNS para baixos  $Re$  e  $Sc$  (Nagaosa e Handler, 2011).

Neste contexto, o objetivo geral do presente estudo é avaliar a influência do número de Reynolds e do número de Schmidt sobre as características do escoamento, da transferência de massa e no coeficiente de transferência de massa na fase líquida de um escoamento turbulento em um canal com deformação negligenciável.

Com base neste objetivo geral foi possível definir os seguintes objetivos específicos:

- Investigar o desempenho do modelo LES no tratamento da turbulência na região próxima à interface gás-líquido;
- Avaliar a influência das condições de escoamento (influência do número de Reynolds), e do tipo de composto (influência do número de Schmidt) na taxa de transferência de massa;

- Calcular o coeficiente de transferência de massa na fase líquida resolvendo numericamente as equações de conservação de massa, da quantidade de movimento e espécie química.

Este trabalho é dividido em 6 capítulos. Após introdução, o Capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica fornecendo uma visão geral de escoamentos turbulentos em canal com transferência de massa. No Capítulo 3 é apresentada a revisão bibliográfica acerca do tema para contextualizar este trabalho em relação à produção científica. A metodologia utilizada neste trabalho é apresentada no Capítulo 4, onde são descritas a modelagem matemática, modelos de submalha e detalhes da simulação computacional. Finalizando, os Capítulos 5 e 6 apresentam resultados e discussões e recomendações para trabalhos futuros, respectivamente.

## 2 Fundamentação teórica

Como descrito no Capítulo 1, o foco de interesse do presente estudo é a transferência de massa em escoamentos turbulentos de canal aberto sob superfície livre não deformável. Este capítulo apresenta alguns fundamentos teóricos sobre o tema em quatro seções: (i) Visão geral do escoamento turbulento em canal, (ii) Turbulência, (iii) Transferência de massa e (iv) Parâmetros governantes.

### 2.1 Visão geral da transferência de massa em canais

O escoamento desenvolvido em um canal aberto é caracterizado pela existência da interface entre dois fluidos: água e ar. As forças de cisalhamento na interface dependem da velocidade do escoamento do ar em relação ao líquido. Canais abertos com superfícies livres são encontrados em áreas da engenharia que envolvem recursos hídricos tais como rios, lagos, esgotos domésticos e industriais, canais de navegação, entre outros. O escoamento da água em canais abertos é governado pelas equações básicas da mecânica dos fluidos e é normalmente um escoamento turbulento.

Para prever o mecanismo de transferência de uma grandeza escalar (massa ou energia) em um escoamento turbulento sob superfície livre, detalhes das estruturas do escoamento precisam ser esclarecidos. Em simulações computacionais, a escala espacial e a escala temporal da turbulência estão relacionadas as dimensões características do domínio que se deseja estudar. No entanto, essas escalas não são suficientes para caracterizar a turbulência. O valor médio da velocidade ou de qualquer outra propriedade não fornece a intensidade da turbulência. Essa intensidade é dada pelo valor de RMS da flutuação da velocidade longitudinal, por exemplo, dado por:

$$rms u'_i = \sqrt{\overline{(u'_i)^2}} \quad \text{Eq. 2.1}$$

onde  $u'_i$  é o valor da flutuação da velocidade na direção  $x$ .

A difusividade molecular de massa de uma substância na água ( $D$ ) é muito menor do que no ar. O número de Schmidt  $Sc = \nu/D$  é a razão da difusividade da quantidade de movimento (viscosidade cinemática) pela difusividade do composto em um fluido. Compostos odorantes, tais como, sulfeto de hidrogênio ( $Sc=580$ ), possuem alta solubilidade na água e grande resistência para transferência de massa na fase líquida. Em contrapartida, compostos com baixa solubilidade (maior volatilidade) possuem números de Schmidt menores. A Figura 2.1 exibe valores dos números de Schmidt e a solubilidade para compostos onde o controle da transferência de massa acontece na fase líquida (por exemplo,  $H_2S$ ) ou na fase gasosa (por exemplo,  $SO_2$ ). Nesse estudo, somente a fase líquida será investigada.

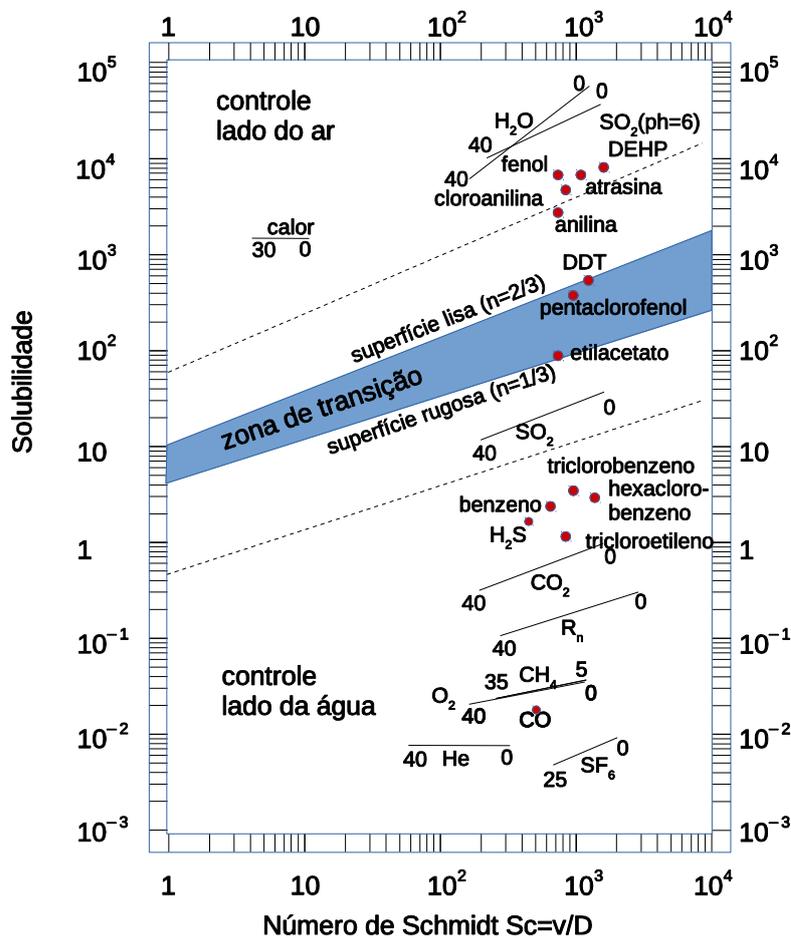


Figura 2.1 - Relação entre solubilidade e número de Schmidt para diversos compostos  
Adaptado de Janzen (2006)

A Figura 2.2 representa esquematicamente o domínio de cálculo do escoamento em um canal aberto. As fronteiras laterais, entrada e saída são translacionalmente periódicas. Estas direções

são consideradas homogêneas. O estudo do transporte da grandeza escalar tem início após o monitoramento das estatísticas da turbulência do escoamento indicar bom desenvolvimento. Este transporte ocorrerá devido ao sentido de giro dos vórtices que se formam no domínio. No escoamento em um canal aberto, as estruturas turbulentas tendem a determinar o fluxo do escalar na interface.

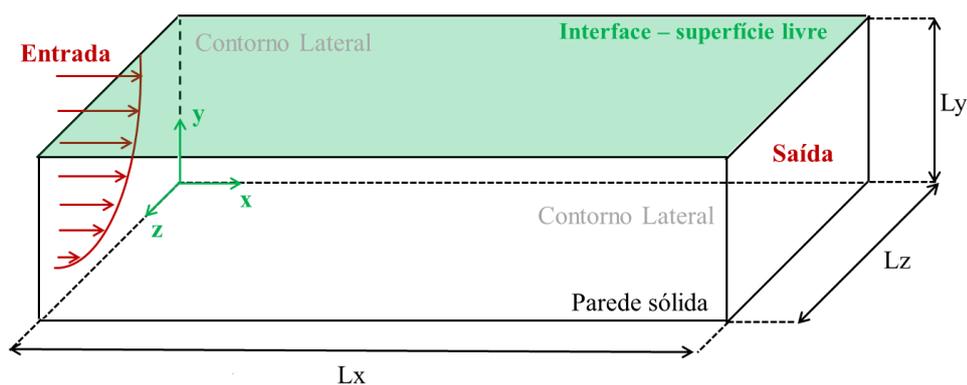


Figura 2.2 – Representação esquemática do canal aberto simulado

## 2.2 Turbulência

Em um escoamento turbulento as partículas do fluido rapidamente se misturam, enquanto se movimentam ao longo da direção principal do escoamento, devido às flutuações aleatórias no campo tridimensional de velocidades. Os movimentos turbulentos são caracterizados por flutuações instantâneas de velocidade, temperatura e outros escalares.

Como exemplo disto, a Figura 2.3 mostra a variação do campo velocidade em um ponto, em função do tempo. A linha tracejada representa a velocidade média da série temporal. A velocidade instantânea, em um ponto genérico, é dada pela soma de um valor médio e da sua flutuação, sendo  $u(t) = \bar{u}(t) + u'(t)$ .

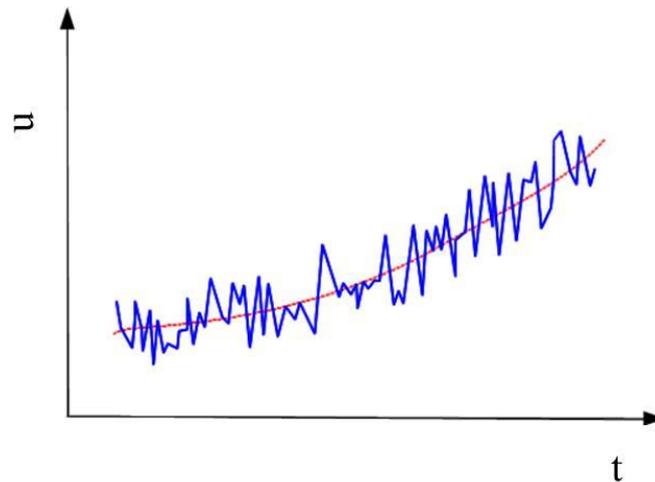


Figura 2.3 - Flutuação da velocidade ao longo do tempo em um ponto do escoamento

Uma das características dos escoamentos turbulentos é a multiplicidade de escalas, ou seja, a presença de vórtices em uma larga gama de escalas temporais e espaciais. Dentro de um campo turbulento, conforme Stull (1988), vórtices de diferentes tamanhos contribuem para energia turbulenta total. Dentro desse espectro, os maiores vórtices drenam energia do escoamento e a transferem para vórtices menores e estes para vórtices ainda menores.

A Figura 2.4 (a) mostra a representação das escalas de um espectro no espaço físico: pequena escala (submalha) e grande escala (resolvida) em uma malha computacional de largura  $\bar{\Delta}$ . As mesmas escalas são representadas em escala logarítmica no espaço de Fourier (domínio da frequência).na Figura 2.4 (b). Nesse domínio, os vórtices passam ser representados por sua frequência: a grande escala (resolvida) corresponde as baixas frequências, enquanto a pequena escala (submalha) corresponde as altas frequências.

Uma observação mais detalhada da Figura 2.4 (b) permite identificar duas escalas de comprimento características que delimitam o subdomínio ou subfaixa inercial da turbulência: a escala de comprimento de Kolmogorov e a escala integral. Os respectivos números de onda são indicados por  $k_\eta$  e  $k_\lambda$ . A escala de Kolmogorov denota a escala dos menores vórtices (Eq. 2.2). Nessa escala de comprimento, a dissipação de energia ocorre devido as forças viscosas. Assim, o comprimento de Kolmogorov ( $\eta$ ) é função da viscosidade cinemática e da dissipação da energia cinética. Na metodologia DNS toda o espectro é resolvido desde as baixas frequências (grandes escalas) às altas frequências (pequenas escalas).

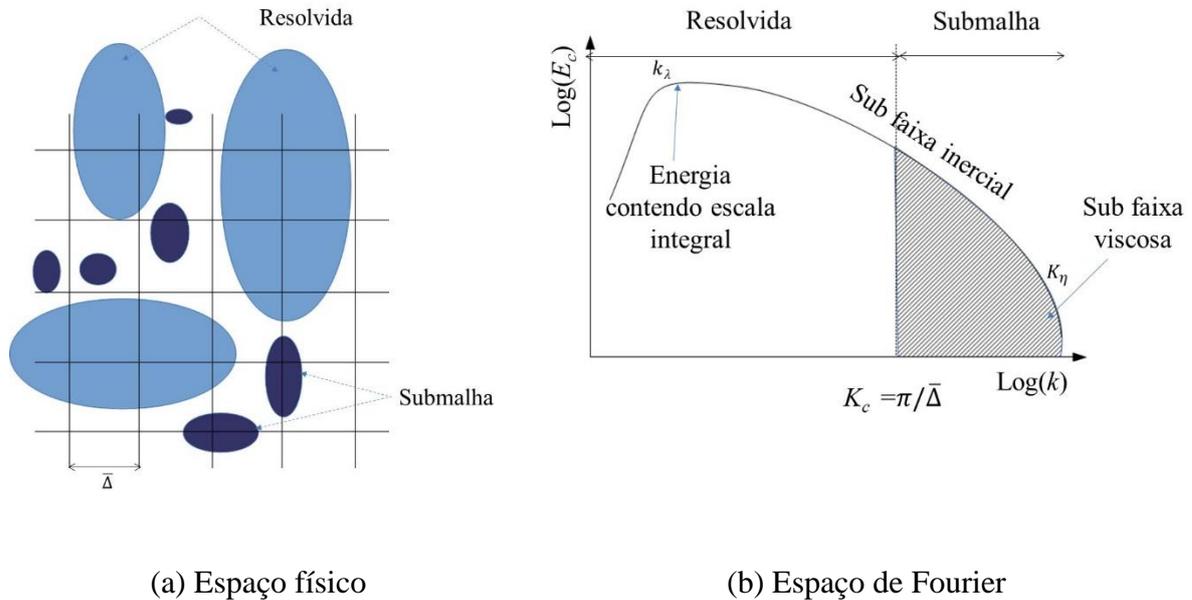


Figura 2.4 – Processo de filtragem: escalas resolvidas e escalas modeladas (adaptado de Sagaut 1998). Representação dos espaços (a) físico e (b) Fourier

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{4}} \quad \tau_\eta = \sqrt{\nu/\varepsilon} \quad u_\eta = (\nu^3 \varepsilon) \quad \text{Eq. 2.2}$$

em que  $\eta$  representa a escala de Kolmogorov e  $\varepsilon$  a taxa de dissipação definida como:

$$\varepsilon = 15 \nu \overline{\left(\frac{\partial u'}{\partial x}\right)^2} \quad \text{Eq. 2.3}$$

A Figura 2.4 (b) mostra a operação de filtragem que introduz o número de onda  $K_c$  que corresponde ao número de onda de corte, a partir da qual, os vórtices são modelados na metodologia LES.

$K_c$  é diretamente calculado a partir do comprimento de corte  $\bar{\Delta}$  no espaço físico ilustrado na Figura 2.4 (a)  $\bar{\Delta}$  é assumido como sendo igual ao tamanho da malha computacional. Pequenos números de onda  $k < K_c$  correspondem às grandes estruturas e grandes números de onda  $k > K_c$  correspondem às pequenas estruturas.

Na metodologia LES, a dinâmica das estruturas das grandes escalas é resolvida, enquanto o efeito da turbulência das pequenas escalas é modelado, usando os modelos de submalha. Esta

metodologia se baseia no fato dos maiores vórtices serem os principais responsáveis pelo transporte da quantidade de movimento, energia e outros escalares. Os menores vórtices são pouco afetados pelas condições de fronteira.

### **2.3 Transferência de massa**

No caso em que a transferência de massa ocorre no sentido líquido-gás e a concentração na fase líquida é maior que a concentração da fase gás, ocorre a volatilização. No entanto, no caso da transferência é no sentido gás-líquido, situação em que a concentração na fase gasosa é maior que concentração da fase líquida ocorre a solubilização.

A volatilização pode ser entendida como o processo de transporte de massa de um determinado composto que se encontra dissolvido em um meio líquido e que se transfere para um meio gasoso adjacente. De um modo geral, a massa do composto de uma determinada espécie química é transferida de uma região de maior concentração para outra de menor concentração.

A força motriz para a transferência de massa é o gradiente de concentração entre a fase líquida e a concentração de equilíbrio na fase gasosa. A emissão é maior se as forças motrizes são elevadas e a resistência à transferência de massa é baixa. O movimento molecular da matéria, não é unicamente dependente da diferença de concentração do soluto. Esse movimento pode também ser decorrente das diferenças de temperatura e pressão.

A interação também pode ocorrer de forma macroscópica. Neste caso, a força motriz é o gradiente de concentração e a resistência ao transporte está associada à interação soluto/meio e à ação externa. Essa ação externa relaciona-se com as características do escoamento do fluido e da configuração geométrica do problema. Esse fenômeno é conhecido como convecção.

Um composto dissolvido na fase líquida pode passar para fase gasosa, com maior ou menor facilidade por difusão, convecção ou por ações externas ou ainda a associação desses mecanismos.

### 2.3.1 Partição do coeficiente de transferência

Segundo Mathtapi e Joshi (2007) em processos de transferência de massa através de uma interface, a resistência mais importante está em uma região muito pequena próxima a interface e várias abordagens são feitas para resolver os fenômenos de transporte através desta fina camada. A teoria mais usada é a teoria dos filmes desenvolvida por Lewis e Whitman (1924) e utilizada por Mackay e Yeun (1983).

A teoria dos filmes sugere que, na interface de um líquido em movimento e um gás, existem duas finas camadas de fluido em repouso. Estas camadas são adjacentes a cada um dos lados da superfície de contato entre o gás e o líquido, nas quais está localizada a resistência à volatilização. O modelo considera que no interior da camada limite de concentração existente na superfície líquida, os efeitos de agitação turbulenta são desprezíveis quando comparados aos do seio do escoamento. Desta forma, quem controla os processos no interior da camada limite de concentração é a difusividade molecular.

De cada lado da interface ar-água existe uma camada limite de concentração denominada filme. Com dado que em cada filme é considerado um gradiente de concentração e que no interior de cada fase exista agitação suficiente para eliminação desse gradiente, ou seja, em pontos além do filme, a turbulência é suficiente para eliminar o gradiente de concentração.

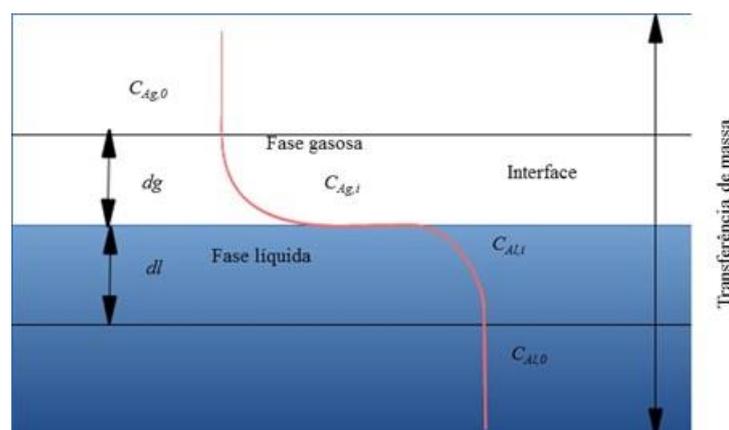


Figura 2.5 – Filme líquido e gás. Adaptado de Gostelow et al. (2002)

De acordo com a teoria dos dois filmes, os fluxos de massa da substância A nas fases líquida ( $J_{Al}$ ) e gasosa ( $J_{Ag}$ ) são dados pela Eq. 2.4 e Eq. 2.5, respectivamente:

$$J_{Al} = -D_l \frac{\partial C_A}{\partial y} = -D_l \frac{(C_{Al,i} - C_{Al,0})}{d_l} \quad \text{Eq. 2.4}$$

$$J_{Ag} = -D_g \frac{\partial C_g}{\partial y} = -D_g \frac{(C_{Ag,i} - C_{Ag,0})}{d_g} \quad \text{Eq. 2.5}$$

onde  $J_{Al}$  e  $J_{Ag}$  são os fluxos de massa da substância A em  $[\text{kg}/\text{m}^2\text{s}]$ , respectivamente, nas fases líquida e gasosa,  $C_{Al}$  são as concentrações dissolvidas do composto no interior do líquido e do gás, respectivamente em  $[\text{kg}/\text{m}^3]$  e  $C_{Al,i}$  e  $C_{Ag,i}$  são as concentrações do composto em  $[\text{kg}/\text{m}^3]$  na interface da fase líquida e gasosa, respectivamente.

As equações Eq. 2.4 e Eq. 2.5 podem ser reescritas como:

$$J_{Al} = -k_l(C_{Al,0} - C_{Al,i}) \quad \text{Eq. 2.6}$$

$$J_{Ag} = -k_g(C_{Ag,0} - C_{Ag,i}) \quad \text{Eq. 2.7}$$

Os coeficientes de transferência de massa  $k_l$  e  $k_g$  nas fases líquida e gasosa, respectivamente, são dados pela Eq. 2.8 e Eq. 2.9.

$$k_l = -\frac{D_l}{d_l} \quad \text{Eq. 2.8}$$

$$k_g = -\frac{D_g}{d_g} \quad \text{Eq. 2.9}$$

onde  $D_l$  e  $D_g$  são os coeficientes de difusão molecular em  $[\text{m}^2/\text{s}]$  nas fases líquida e gasosa e  $d_l$  e  $d_g$  são as espessuras do filme em  $[\text{m}]$  conforme mostrado na Figura 2.5, que correspondem a espessura da camada limite de concentração.

Os valores de  $k_l$  e  $k_g$  dependem da velocidade do fluido, da temperatura, da geometria de estudo e de propriedades do soluto, como o coeficiente de difusão e viscosidade. As concentrações

$C_{Al,i}$  e  $C_{Ag,i}$  em condições de equilíbrio podem ser relacionadas por meio da Constante de Henry ( $K_H$ ) na sua forma adimensional conforme apresentado por Munz e Roberts (1989).

$$K_H = \frac{C_{Ag,i}}{C_{Al,i}} \quad \text{Eq. 2.10}$$

Munz e Roberts (1989) disponibilizam outras maneiras de expressar a Constante de Henry e suas respectivas correlações. Com frequência, a Constante é também expressa como uma relação entre a pressão de vapor do gás e a concentração da substância na fase líquida com unidade em atm.m<sup>3</sup>/mol.

Essa situação representa um equilíbrio dinâmico, sendo considerado que o fluxo de massa no sentido gás-líquido compensa o fluxo de massa no sentido líquido-gás de forma que o balanço final se torna nulo. Nos casos em que esse equilíbrio não está configurado, os fluxos não se anulam, sendo verificada uma transferência de massa efetiva entre as fases. Mesmo nessas condições em que há transferência de massa efetiva entre as fases considera-se que na interface gás-líquido o equilíbrio estabelece de maneira instantânea.

Considerando  $J_{Ag} = J_{Al} = J_A$  (fluxo total), na situação de equilíbrio é obtida a equação:

$$k_l(C_{Al,i} - C_{Al,0}) = k_g(C_{Ag,i} - C_{Ag,0}) \quad \text{Eq. 2.11}$$

depois de substituir Eq. 2.10 em Eq. 2.11 obtém-se:

$$C_{Al,i} = \frac{k_l C_{Al,0} + k_g C_{Ag,0}}{k_g K_H + k_l} \quad \text{Eq. 2.12}$$

Substituindo Eq. 2.11 em Eq. 2.8 tem-se:

$$J_{Al} = \frac{k_l k_g K_H}{k_l + k_g K_H + k_l} = K_L \left( C_{Al,0} - \frac{C_{Ag,0}}{K_H} \right) \quad \text{Eq. 2.13}$$

onde  $K_L = \frac{k_l k_g K_H}{k_l + k_g K_H + k_l}$  é o coeficiente global de transferência de massa na fase líquida que pode ser reescrito como:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{k_l} + \frac{1}{k_g K_H} \quad \text{Eq. 2.14}$$

Analogamente para a fase gasosa a seguinte equação é obtida:

$$J_{Ag} = \frac{k_g k_l}{k_l + k_g K_H} (C_{Al,0} K_H - C_{Ag,0}) = K_G (C_{Al,0} K_H - C_{Ag,0}) \quad \text{Eq. 2.15}$$

onde  $K_G = \frac{k_g k_l}{k_l + k_g K_H}$  é o coeficiente global de transferência de massa na fase gasosa que pode ser reescrito como:

$$\frac{1}{K_G} = \left( \frac{K_H}{k_l} \right) + \frac{1}{k_g} \quad \text{Eq. 2.16}$$

Para usar a Eq. 2.13, é necessário conhecer os valores de  $C_{Al,0}$ ,  $C_{Ag,0}$ ,  $K_H$  e  $K_L$ . para uma camada de mistura homogênea  $C_{Al,0}$  pode ser assumido igual a  $C_{Al,\infty}$ , porém  $C_{A,g}$  não pode ser assumido igual a  $C_{A,g,\infty}$  e uma medição na fase gasosa muito próxima a interface precisa ser realizada. Nesta metodologia os fluxos são determinados com base no coeficiente global de transferência de massa na fase líquida ( $K_L$ ). Entretanto, a determinação desses coeficientes de transferência requer medições experimentais ou simulações computacionais para determinação das variáveis de interesse, tais como:  $k_g$ ,  $k_l$ ,  $d_g$  e  $d_l$ .

## 2.4 Parâmetros governantes

Importantes para o estudo da transferência de massa na interface líquido-gás, o número de Reynolds e o número de Schmidt são os parâmetros adimensionais governantes. O primeiro relaciona-se ao escoamento, e portanto, a turbulência e a camada hidrodinâmica. E o segundo, refere-se ao composto, sendo relacionado a subcamada difusiva. O foco de interesse deste trabalho é estudar e detalhar a influência desses parâmetros na formação das camadas hidrodinâmicas e de concentração junto a interface. Além disto, deseja-se investigar a influência desses parâmetros no transporte da grandeza escalar ao longo do domínio de cálculo e na taxa de emissão do composto por volatilização.

Reboux et al. (2006) observam que valores de interesse em aplicações práticas de números de Reynolds são da ordem  $10^3$ . No caso de números de Schmidt, Hasegawa e Kasagi(2009) observam que esses valores estão na faixa de 1 a 200. Para compostos odorantes, a constante da lei de Henry na sua forma adimensional, segundo Hudson e Ayoko(2008) possui valores inferiores a  $10^{-3}$ .

O número de Reynolds é uma grandeza adimensional calculada pela Eq. 2.17 que expressa a importância das forças de inércia (associadas ao efeito convectivo) em relação às forças viscosas. Este número é usado para caracterizar o tipo de escoamento (laminar ou turbulento). Para um valor pequeno de Reynolds o fluxo exibe pequenas instabilidades. A viscosidade do fluido tende a reduzir os efeitos destas perturbações e dissipar as oscilações. Estas oscilações são amortecidas se os efeitos viscosos forem grandes o suficiente, o escoamento é dito laminar. Nos casos em que os esforços viscosos não são fortes o suficiente para amortecer as oscilações em relação às forças inerciais, as instabilidades geradas provocam movimento de rotação e o escoamento é dito turbulento.

$$Re = \frac{\rho ul}{\mu} \quad \text{Eq. 2.17}$$

onde  $u$  é a velocidade característica,  $\rho$  é a massa específica do fluido e  $l$  é o comprimento característico e  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido. O valor de Reynolds crítico estabelece a passagem do regime laminar para o turbulento é determinado experimentalmente para cada configuração. Neste trabalho, o número de Reynolds é calculado a partir da velocidade de fricção ( $u_*$ ) dada por  $\sqrt{\tau_*/\rho}$  onde  $\tau_*$  é a tensão de cisalhamento na parede sólida e  $\rho$  a massa específica do fluido.

O número de Schmidt corresponde à razão entre os processos de difusão de quantidade de movimento e de massa, sendo proporcional a relação das espessuras das camadas hidrodinâmica e de difusão de massa. A expressão Eq. 2.18 fornece os valores desse adimensional.

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad \text{Eq. 2.18}$$

onde  $\nu$  e  $D$  são respectivamente a viscosidade cinemática e a difusividade da espécie química que se difunde no fluido. Para uma dada temperatura, um composto, que apresenta difusividade

diferente quando dissolvido em fluidos diferentes (por exemplo, água e ar), apresenta números de Schmidt diferentes. O número de Schmidt considerado para o sulfeto de hidrogênio ( $H_2S$ ) no presente trabalho é 580 (difusão de  $H_2S$  em água à  $20^\circ C$ ). Outro parâmetro adimensional importante é a constante da lei de Henry adimensional dada pela Eq. 2.10.

A Figura 2.6 exhibe a relação entre a volatilização, turbulência e a resistência à transferência de um composto considerando água e ar. Conforme mencionado, esta resistência pode ser mais importante na fase líquida, na fase gasosa ou em ambas as fases, dependendo das propriedades químicas das substâncias envolvidas (solventes e solutos).

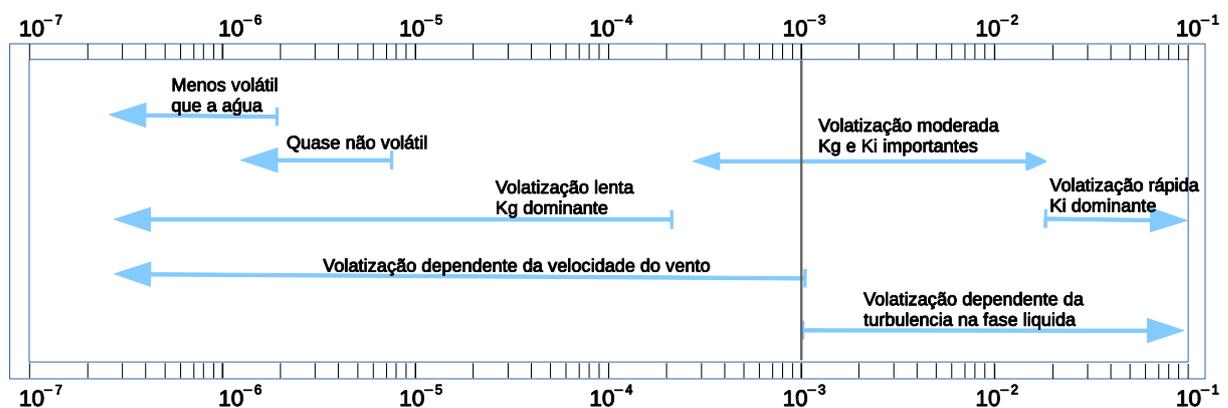


Figura 2.6 - Relação entre a constante da lei de Henry ( $K_H$ ) e volatilidade - Adaptado de Hudson e Ayoko (2008)

Nos casos em que a constante da lei de Henry adimensional tem valor inferior a  $10^{-3}$  o processo de volatilização é dependente da velocidade do vento, enquanto para valores desta constante superiores a  $10^{-3}$  a volatilização é dependente da turbulência na fase líquida.

Sander (1999) apresenta valores para a constante da lei de Henry para substâncias orgânicas e inorgânicas de importância ambiental à  $20^\circ C$  (escrito em uma forma dimensional como  $K_H/RT$ ). Foram apresentados nove valores de referência da constante da lei de Henry para o sulfeto de hidrogênio compreendidos entre  $1.0 \times 10^{-1}$  e  $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/atm.dm}^3$  sendo que seis das referências citadas correspondem ao valor igual a  $1.0 \times 10^{-1} \text{ mol/atm.dm}^3$ . Hudson e Ayoko (2008) analisaram valores típicos da Constante de Henry para diversos compostos odorantes.

## 3 Transferência de massa em escoamentos turbulentos

O objetivo do presente capítulo é apresentar pesquisas mais relevantes sobre a transferência de massa em escoamentos turbulentos desenvolvidos em canal aberto com superfícies livre com deformação negligenciável. O capítulo é dividido em três seções principais: (i) DNS de estruturas de vórtices e transferência de grandeza escalar, (ii) LES de estruturas de vórtices e transferência de grandeza escalar e (iii) Experimentos de laboratório de transferência de massa.

Vários estudos vêm sendo realizados ao longo destes anos devido ao grande interesse das áreas industrial e ambiental no tema transferência de massa em escoamentos turbulentos. As principais abordagens para estudar os fenômenos envolvidos são experimentos numéricos e experimentos de laboratório. Se por um lado, os experimentos de laboratório são essenciais para o completo entendimento dos processos, por outro eles representam altos custos e demandam controle rigoroso dos parâmetros envolvidos, o que limita a sua aplicação.

Com relação aos experimentos numéricos, basicamente, existem duas grandes classes de metodologias para lidar com escoamentos turbulentos: DNS e LES, além da tradicional RANS. O que distingue estas duas metodologias é a resolução integral ou não de todas as escalas do espectro. De fato, os trabalhos de DNS são limitados a baixos números de Reynolds por demandarem alta resolução espacial e temporal. Em contraste, por simular a parte do espectro referente as grandes escalas, a metodologia LES permite a simulação de escoamentos com número de Reynolds maiores. Surge, no entanto, outro desafio. Nos estudos de transferência de massa, ou seja, naqueles estudos onde a grandeza escalar é resolvida, os dados disponíveis são pouco detalhados, e não tratam de compostos cujo número Schmidt é elevado. Embora muitas pesquisas utilizem simulações computacionais para resolver o campo de velocidade e o campo de concentração, não existem estudos que considerem as características do composto e que investiguem a influência de parâmetros físicos na transferência de massa.

O objeto de estudo do presente trabalho é a simulação numérica do escoamento turbulento com transferência de massa em um canal aberto. A metodologia LES foi escolhida para incluir os

efeitos da turbulência no escoamento, porque permite experimentos com números de Reynolds e número de Schmidt mais elevados e de interesse ambiental. Um adequado refinamento da malha na direção normal do escoamento torna possível o cálculo do coeficiente de transferência de massa da fase líquida de alguns compostos. Entre estes compostos destaca-se o sulfeto de hidrogênio, importante composto odorante presente em estação de tratamento de esgoto (ETE). A resolução da malha nas outras duas direções permanece inalterada. Esta estratégia relativa a malha possibilita o cálculo do coeficiente de transferência de massa porque permite que maiores gradientes de concentração sejam calculados com maior acurácia.

No presente estudo foram resolvidas as equações básicas que regem a dinâmica do fluido: conservação da massa, conservação de quantidade de movimento e conservação da espécie química e algumas hipóteses foram assumidas. Na resolução numérica do modelo matemático proposto, o fluido (água) foi tratado como um contínuo. As propriedades do fluido têm valor definido em cada ponto do espaço, com isso, tornam-se funções contínuas do espaço e do tempo. A água foi considerada um fluido newtoniano. Um fluido newtoniano tem viscosidade constante para uma dada temperatura, independente da taxa de cisalhamento sob a qual é submetido. Também foi considerado fluido incompressível, portanto, a massa específica, expressa por  $\rho$  foi assumida constante, isto é, não varia com as variações espaciais e temporais da pressão termodinâmica. A massa do composto odorante dissolvido, também foi considerada desprezível na resolução do modelo. Ao longo do domínio, também as variações de temperatura são consideradas desprezíveis.

A fim de ilustrar significativos aspectos deste trabalho, é importante apresentar outros trabalhos sobre o tema transferência de massa em escoamentos turbulentos de canal aberto sob superfície livre com deformação negligenciável, categorizados de acordo com duas formas diferentes de abordar o problema: experimental e numérica. As duas primeiras seções do presente capítulo tratam da modelagem matemática dos fenômenos, uma ênfase especial é dada ao uso da simulação numérica. A última seção é dedicada a investigações experimentais realizadas em laboratório.

Estudos utilizando simulações computacionais mostram importantes detalhes do campo de velocidades e concentração próximas à superfície e relacionam o campo de concentração com os vórtices ejetados na direção da superfície. O fluxograma apresentado na Figura 3.1 sintetiza

as atividades que fizeram parte desta revisão relacionando-as as lacunas existentes na literatura e as principais atividades e objetivos do presente estudo.

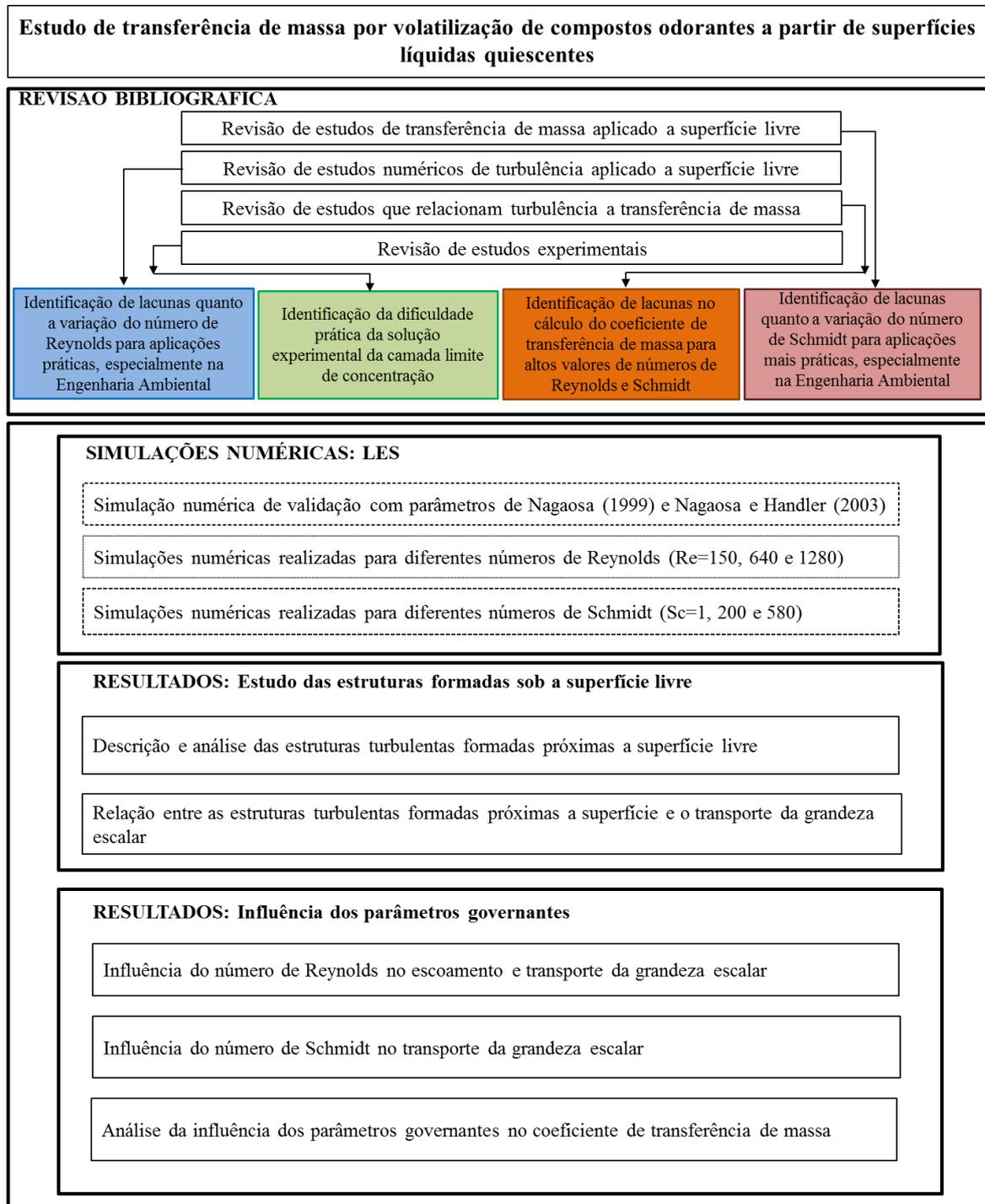


Figura 3.1 – Fluxograma das atividades realizadas neste estudo

De um modo geral, as simulações efetuadas com DNS são limitadas a baixos valores de Reynolds, devido ao grande esforço computacional. O número de Schmidt desses estudos é quase sempre igual a unidade. Em contrapartida, os estudos que utilizam a metodologia LES tratam de escoamentos com números de Reynolds maiores, mas não existe na literatura estudos onde haja uma preocupação com o tipo de composto ou com a influência de ambos, os números de Reynolds e Schmidt, no coeficiente de transferência de massa.

### 3.1 DNS de estruturas de vórtices e transferência da grandeza escalar

Vários experimentos numéricos com DNS foram realizados na faixa de número de Reynolds de 130 a 600 (baseado na velocidade de fricção) e número de Schmidt igual a 1. Os trabalhos sumarizados aqui apresentam e discutem resultados de estatísticas da turbulência tais como momentos de 1ª ordem (média) e 2ª ordem (RMS) das variáveis de interesse validados, em geral, com dados experimentais. Em alguns casos são também apresentados os momentos de 3ª ordem (*skewness*) e 4ª ordem (*flatness*).

Kim et al. (1987) estudaram o escoamento turbulento em um canal aberto usando DNS com número de Reynolds igual a 180 (baseado na velocidade de fricção). O número de Schmidt usado foi igual a unidade. As dimensões do domínio foram  $4\pi\delta \times 2\pi\delta \times \delta$  onde  $\delta$  é altura do canal. Foram utilizados 192x129x160 pontos. No limite superior e inferior do domínio os autores usaram a condição de deslizamento livre e não deslizamento, respectivamente. As estatísticas da turbulência foram comparadas com resultados experimentais.

Nagaosa(1999) usou DNS para simular o escoamento turbulento em um canal aberto com número de Reynolds 150 (baseado na velocidade de fricção)  $2\pi\delta \times \pi\delta \times \delta$  onde  $\delta$  é a altura do canal. Foram usados 96 nós na direção do escoamento, 108 nós na direção transversal e 81 na direção normal ao escoamento. Condições de contorno periódica foram assumidas nas direções transversal e longitudinal ao escoamento, condição de não deslizamento no contorno inferior e deslizamento livre no contorno superior. O estudo detalhou a estruturas coerentes turbulentas formadas sob a superfície livre e a interação dessas estruturas com a superfície. Estruturas coerentes são estruturas existentes em um fluxo turbulento. Essas estruturas são estruturas persistentes de fácil visualização. A validação foi feita usando dados experimentais. O estudo mostrou que existe uma relação direta entre o tensor tensão de Reynolds e o fluxo turbulento

de transporte da grandeza escalar. O estudo de Nagaosa e Handler (2003) discutiu o escoamento com número de Reynolds 300 e mesmas condições de contorno de Nagaosa (1999). Como resultado, obteve perfis de concentração para os números de Reynolds iguais a 150 e 300 e um único número de Schmidt igual a unidade. Calculou também o coeficiente de transferência da concentração para ambos os casos. A turbulência foi visualizada através do critério  $Q$ . O critério  $Q$  é um escalar dado por  $Q = -1/2 (S_{ij}S_{ij} - \Omega_{ij}\Omega_{ij})$  onde  $S_{ij}$  e  $\Omega_{ij}$  representam, respectivamente, o tensor taxa de deformação e o tensor taxa de rotação. O tensor taxa de deformação é dado por  $S_{ij} = -1/2(\partial u_i/\partial x_j + \partial u_j/\partial x_i)$  e o tensor taxa de rotação é dado por  $\Omega_{ij} = -1/2(\partial u_i/\partial x_j - \partial u_j/\partial x_i)$  com  $i = 1,2,3$ . Valores positivos do critério  $Q$  referem-se a regiões do fluido onde a rotação domina e nas regiões de valores negativos de critério  $Q$ , a deformação domina. No estudo realizado por Nagaosa (2005), foi investigado o escoamento de um canal aberto com fluxo turbulento e transferência de massa para números de Reynolds variando de 150 a 400 (baseados na velocidade de fricção) e um único número de Schmidt também igual a unidade. Para todos os números de Reynolds foram apresentadas as estatísticas da turbulência da velocidade e da concentração. As discussões desses trabalhos não consideram aspectos relativos a deformação e contaminação da superfície.

Ao longo dos anos, mesmo com o avanço da computação e do processamento em paralelo, as limitações do uso do DNS em estudos com números de Reynolds e número de Schmidt mais elevados permaneceram. Banerjee (2006) usou DNS para estudar o escoamento em um canal aberto com número de Reynolds igual a 150 (baseado na velocidade de fricção). Investigou a estrutura de turbulência do lado líquido na interface gás-líquido e seus efeitos sobre a transferência de calor e massa. O campo de velocidade e o campo de flutuação de velocidade foram obtidos experimentalmente usando DPIV. DPIV é uma técnica baseada no processamento digital de imagens de partículas traçadoras previamente distribuídas no fluido e iluminadas por plano de luz laser pulsado.

Nagaosa (2010) usando DNS investigou o escoamento turbulento de um canal aberto com escoamento totalmente desenvolvido e número de Reynolds (baseado na velocidade de fricção) igual a 150. No estudo, foi analisada a relação entre a hidrodinâmica na interface e o fluxo escalar turbulento. O divergente de superfície é dado por  $\gamma = (\partial u'/\partial x + \partial w'/\partial z) = -\partial v'/\partial y$  onde  $u'$ ,  $v'$  e  $w'$  são as respectivas flutuações de velocidade nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento.

Nagaosa e Handler (2011) modelaram os mecanismos de transferência da grandeza escalar de um escoamento totalmente desenvolvido a partir de uma superfície livre de um canal aberto. Como condição de contorno foram assumidas sem deslizamento no fundo e com deslizamento livre na superfície. Duas escalas de tempo características na interface foram propostas para a predição da transferência do escalar com base na abordagem da renovação de superfície. A escala de tempo determinado pelas escalas de velocidade e comprimento característico e uma escala do tempo derivada do divergente de superfície. O efeito do número de Schmidt no fluxo escalar em uma superfície livre não foi examinado, a atenção do trabalho foi voltada para o efeito do número de Reynolds no fluxo escalar e os resultados foram comparados com experimentos de laboratório.

Nagaosa e Handler (2012) usaram DNS para estudar o fluxo escalar em uma superfície livre em um canal aberto com escoamento totalmente desenvolvido. Os autores estudaram o efeito do número de Reynolds em mecanismos de transferência da grandeza escalar e na sua taxa de transferência em toda a superfície. Foram investigados números de Reynolds (baseados na velocidade de fricção) na faixa de 150 a 600 e a superfície foi considerada com deformação negligenciável. Os resultados desse estudo mostram que o transporte escalar na superfície livre pode ser previsto usando essas escalas de tempo e que o divergente de superfície relaciona-se com a transferência de massa.

Khakpour et al. (2012) usou DNS para simular o escoamento turbulento em um canal aberto. Foi usado um domínio computacional de dimensões  $2\pi \times \pi \times 1$  nas direções longitudinal, transversal e normal ao escoamento. Foram utilizados 128 pontos em cada direção, após teste de malha com  $192^3$  pontos e  $256^3$  pontos. Estruturas coerentes do escoamento foram identificadas e relacionadas com o fluxo da grandeza escalar usando o conceito de divergente de superfície. O divergente de superfície é dado por  $\gamma = (\partial u' / \partial x + \partial w' / \partial z) = -\partial v' / \partial y$  onde  $u'$ ,  $v'$  e  $w'$  são as respectivas flutuações de velocidade nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento.

Na presente seção foram sumarizados estudos de escoamentos de canais abertos realizadas com o uso de DNS. Esses estudos tratam da interação da turbulência e superfície livre, no entanto, se restringem a baixos números de Reynolds e número de Schmidt igual a 1, devido principalmente à maior exigência de recursos computacionais.

### 3.2 LES de estruturas de vórtices e transferência da grandeza escalar

Conforme mencionado anteriormente, estudos de transferência de massa utilizando simulações numéricas exigem altas resoluções no espaço e no tempo, o que limita consideravelmente o número de Reynolds e o número de Schmidt a baixos valores. Esta inviabilidade prática do uso de DNS motivou autores ao longo dos anos a investigarem o uso da LES e seus diferentes modelos de submalha em superfícies livres. Em geral, os trabalhos discutem resultados de estatísticas da turbulência tais como médias e RMS das variáveis de interesse e a relação dessas estatísticas com a transferência de massa.

O elevado grau de liberdade combinado com um comportamento aleatório torna a tarefa de prever um escoamento turbulento bastante desafiadora. A metodologia LES é uma alternativa interessante com menor esforço computacional quando comparada a DNS. Os primeiros trabalhos com metodologia LES foram os trabalhos de Smagorinsky (1963). A principal motivação do trabalho de Smagorinsky era simular apenas as grandes escalas dos escoamentos atmosféricos, na impossibilidade de simular todo o espectro de escalas.

Calmet e Magnaudet (1996) utilizaram LES com modelo de submalha misto dinâmico (DMM - *Dynamic Mixed Model*) para estudar o escoamento e os mecanismos de transferência de massa de um canal aberto com número de Reynolds (baseado na velocidade de fricção) igual a 640 e número de Schmidt iguais a 1 e 200. A deformação na superfície livre foi considerada desprezível. As condições de contorno aplicadas foram sem deslizamento no fundo e na superfície livre. Condições periódicas foram impostas a partir de um gradiente de pressão nas outras duas direções. As dimensões do domínio computacional foram  $2\pi\delta \times 2\delta \times 3\pi\delta/4$ , respectivamente, nas direções longitudinal, transversal e normal ao escoamento, com  $\delta$  a metade da altura do canal. Este domínio foi discretizado com  $32 \times 64 \times 64$  pontos para o número de Schmidt igual a 1, respectivamente, nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento. O coeficiente de transferência de massa foi calculado para cada número de Schmidt. Para número de Schmidt igual a 200 foi demonstrado que a flutuação do campo concentração somente são significantes próximas a parede. As comparações das várias quantidades nessa região indicam a relação entre as espessuras das subcamadas difusivas formadas em cada caso.

Calmet e Magnaudet (1998) usaram LES com DMM para estudar o escoamento de um canal aberto com número de Reynolds 1280. Foram investigadas a influência do número de Schmidt na transferência de massa de compostos com número Schmidt igual a 1 e número de Schmidt igual a 200. Também foi verificada a conveniência da metodologia LES para o estudo de escoamento em canal aberto com transferência de massa. As condições de contorno usadas no fundo e na superfície livre foram sem deslizamento e deslizamento livre, respectivamente. Nas outras direções foram usadas condições periódicas geradas a partir de um gradiente de pressão. As dimensões usadas para o domínio computacional foram  $2\pi\delta \times 2\delta \times 3\pi\delta/4$ , respectivamente, nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento, onde  $\delta$  é a metade da altura do canal. Este domínio foi discretizado com  $32 \times 64 \times 64$  pontos para o número de Schmidt igual a 1. Para o número de Schmidt igual a 200 o domínio foi discretizado com  $32 \times 86 \times 64$  pontos. Foram estudadas as principais estatísticas da flutuação do campo de concentração e concluído que a intensidade máxima destas flutuações depende do número de Schmidt.

Dong et al. (2003) estudaram a transferência de massa de um canal aberto com superfície livre com deformação desprezível. O número de Reynolds igual a 13.800 (calculado com base na velocidade média) Os valores do número de Schmidt investigados variaram de 1 a 200. As dimensões do domínio usadas foram:  $2\pi\delta \times \pi\delta \times 2\delta$ , respectivamente, nas direções longitudinal, transversal e normal ao escoamento. O modelo de submalha Smagorinsky dinâmico foi usado para o fechamento da turbulência. As condições de contorno para velocidade foram sem deslizamento (fundo) e deslizamento livre (topo). Condições de contorno periódicas foram impostas nas outras duas direções a partir de um gradiente de pressão. O desempenho da LES foi investigado associado a transferência de massa. A metodologia LES utilizando modelo de submalha dinâmico mostrou-se adequada para estudo do problema. Para cada número de Schmidt, a malha na direção normal ao escoamento foi refinada. Os maiores valores de números de Reynolds e número de Schmidt foram calculados com malhas mais refinadas.

Calmet e Magnaudet (2003) investigaram a turbulência próxima à superfície líquida de um canal aberto com deformação desprezível utilizando LES com modelo de submalha dinâmico. Os autores estudaram o comportamento da turbulência próxima à superfície livre sem explorar refinamentos de malha e modelos de submalha. Completando o estudo feito por Calmet e Magnaudet (1998), os autores estudaram os resultados próximos à superfície obtidos para um único número de Reynolds igual a 1280. No estudo de Magnaudet e Calmet (2006) foi usado

LES com modelo de submalha dinâmico para investigar a transferência de massa em superfície livre de um canal aberto com fluxo turbulento e superfície com deformação desprezível. Foram mantidas as dimensões do domínio e condições de contorno usadas por Calmet e Magnaudet (2003). Também foram mantidos o número de Reynolds ( $Re=1280$ ) e número de Schmidt ( $Sc=1$  e  $Sc=200$ ) do estudo de Calmet e Magnaudet (2003). A discretização foi feita usando 32 e 64 pontos, respectivamente, nas direções longitudinal e transversal ao escoamento. Na direção normal, a malha foi refinada de modo que pelo menos três pontos fossem localizados dentro da subcamada viscosa. A malha foi refinada próxima à superfície livre e próximo a parede do fundo sendo os pontos distribuídos simetricamente. Nesse caso, em que a turbulência é produzida longe da região de interesse (superfície livre), os autores desenvolveram uma normalização adequada e independente da fonte  $y_s^+ = y_s \cdot u_* / \nu$ .

Com o avanço tecnológico e o desenvolvimento do processamento paralelo, a metodologia LES tornou-se ainda mais aplicável surgindo novos modelos de submalha. De acordo com McDonough (2007) modelos de submalha são usados em LES para quantificar a parte não resolvida da solução. Escala resolvida é uma terminologia usada em LES para a parte da solução que é diretamente calculada referente as grandes escalas. Existem diferentes abordagens para construção de tais modelos, entre os quais. Zang et al. (1993), Salvetti e Banerjee (1995), Shen e Yue(2001) tratam dos modelos de submalha usados na metodologia LES.

Zang et al. (1993) observaram que o modelo de Smagorinsky para cálculo da viscosidade turbulenta apresentava o inconveniente de utilizar a constante  $C_s$  para avaliar a influência das estruturas da submalha. No entanto, esta influência é específica para o escoamento. Visando resolver o problema, Zang et al. (1993) modificaram o modelo dinâmico de Germano et al. (1991) com a utilização do modelo misto de Bardina et al. (1980). O modelo misto dinâmico calcula explicitamente o termo de Leonard modificado e somente modela os termos cruzados e os tensores de Reynolds. Nesse trabalho, o modelo de submalha DMM foi incorporado à solução de volumes finitos, em escoamentos com número de Reynolds (baseados na velocidade média do escoamento) iguais a 3200, 7500, 10000, tendo demonstrado bons resultados quando comparado com dados experimentais.

Salvetti e Banerjee (1995) testaram três modelos de submalha LES para simular o escoamento um canal aberto: o modelo dinâmico de Germano et al. (1991), o modelo misto dinâmico de Zang et al.(1993) e o modelo dinâmico de dois parâmetros (DTM - *Dinamic Two Parameter*)

de Salvetti e Banerjee (1995). Os autores desenvolveram um modelo dinâmico que é uma combinação do modelo de Smagorinsky e do modelo de Bardina et al. (1980) com os dois coeficientes determinados dinamicamente por meio da identidade Germano et al. (1991). O modelo proposto mostrou-se adequado para o estudo de escoamentos em canais abertos.

O decaimento da turbulência de um canal aberto com número de Reynolds de 60,4 foi investigado em Salvetti et al. (1997) usando LES com diferentes modelos de submalha. Os resultados foram comparados com os resultados de DNS. A malha computacional usada  $32 \times 32 \times 32$  pontos, respectivamente nas direções longitudinal, transversal e normal ao escoamento com domínio computacional de  $4\pi\delta \times 2\pi\delta \times 2\delta$ , respectivamente, nas direções longitudinal, transversal e normal ao escoamento. No início da simulação a condição na parede de fundo foi alterada para condição de sem deslizamento e ao mesmo tempo o gradiente de pressão que impulsiona o fluxo foi desligado (passou a ser zero). Esta troca de condição de contorno elimina a geração de turbulência e o fluxo começa a decair com o tempo. Esse decaimento é simulado com LES nos modelos DSM (*Dynamic Smagorinsky Model*), DTM (*Dinamic Two Parameter*) e os dados de flutuação na direção do escoamento foram analisados contra os dados de DNS. Segundo Salvetti et al. (1997) para a malha mais fina, os valores de RMS foram mais baixos do que os obtidos com a malha mais grosseira, indicando que a resolução mais alta produz uma aceleração do processo de decaimento da turbulência no LES com a malha mais fina. Isto leva a uma melhor concordância com os dados de DNS, especialmente no que diz respeito ao RMS da componente normal da velocidade. Com relação à velocidade, o refinamento não leva a diferenças consideráveis entre os valores obtidos pelo LES e pelo DNS.

Shen e Yue (2001) investigaram a aplicação de diversos modelos de submalha de LES em superfície livre e a interação entre o fluxo cisalhante turbulento e a superfície livre de um canal aberto de fluxo turbulento com baixa deformação na superfície. Os modelos de turbulência SM (*Smagorinsky Model*), DSM (*Dynamic Smagorinsky Model*), DASM (*Dynamic Anisotropic Selective Model*) e DFFM (*Dynamic Free-Surface Function Model*) foram validados para Reynolds 1400 e número de Froude 0,7. Esse parâmetro adimensional é a razão entre as forças de inércia e as forças gravitacionais e é importante nos estudos em que os efeitos da superfície (deformação) são considerados. Os resultados foram comparados com um conjunto de 25 simulações feitas com DNS usando malha de  $128 \times 128 \times 192$ . Para a simulação LES foi usada

malha de 32x32x96. Foram assumidas condições de contorno de sem deslizamento na superfície e deslizamento livre no fundo e condições periódicas nas direções longitudinal e transversal do escoamento. O número de Reynolds desta simulação de validação foi 1400 (baseado na velocidade de fricção). Os autores analisam os dados de DNS e os vários modelos de submalha a partir da quantidade de energia transferida das grandes escalas para as menores escalas e concluíram que esta quantidade é reduzida significativamente na superfície livre. Esta transferência manifesta-se principalmente na região do seio do escoamento. A região da superfície livre é caracterizada pela presença de vórtices em forma de grampos de cabelo, cuja cabeça está próxima à superfície e as duas pernas estão dentro do seio do escoamento. De acordo com o estudo, essas regiões dão origem a regiões de *splats* que são regiões onde o fluido a jusante é advectado para a superfície e a transferência de energia ocorre no sentido da pequena escala para grande escala (transferência inversa de energia). Depois de validados, os modelos DSM, DSAM, DFFM foram aplicados em um escoamento com número de Reynolds 3000 e número de Froude 1,4 sendo seu desempenho comparados em termos de tensão de cisalhamento, intensidade turbulenta e tempo de CPU. O modelo de submalha dinâmico mostrou-se adequado a investigação da turbulência sob a superfície livre.

Abba et al. (2003) analisaram o desempenho de LES com vários modelos de submalha. Os resultados foram comparados com dados de DNS de malha 512<sup>3</sup>. Na metodologia LES é importante representar a troca de energia entre as grandes escalas e pequenas escalas por um modelo adequado. Foram realizadas simulações com número de Reynolds 180 e 660.

Na presente seção foram revisados os estudos de escoamentos de canais abertos realizados com o uso de LES. Os estudos que utilizam a metodologia LES investigam escoamentos com número de Reynolds e número de Schmidt maiores, não existindo, no entanto, trabalhos que tratem do tipo de composto e que associem esse composto a transferência de massa.

### **3.3 Experimentos de laboratório de estruturas de vórtices e transferência de massa**

Experimentos detalhados estabeleceram as principais tendências da distribuição normal das flutuações de velocidade dos fluxos de canal aberto. Ao longo dos anos, técnicas como PIV e DPIV vem sendo incorporadas aos experimentos de laboratório. Essas técnicas permitem obter

campos de velocidade a partir da medição do deslocamento de partículas inseridas no escoamento em estudo.

Komori et al. (1989) investigaram experimentalmente o escoamento de um canal aberto com transferência de massa usando LDA. A relação entre a renovação da superfície e o movimento ascendente de fluido proveniente da parede de fundo do canal foram estudadas. Os movimentos que aparecem na região da superfície livre podem ser originários de fenômenos que ocorrem na região intermediária entre as zonas linear e logarítmica do escoamento. A frequência de renovação depende das variáveis de parede e do número de Reynolds do escoamento. O estudo concluiu que a transferência de massa através da interface gás-líquido é dominada pelos turbilhões de larga escala, assim como o coeficiente de transferência de massa.

Komori et al. (1990) realizaram experimentos de transferência de massa em um canal aberto e investigaram a relação dos movimentos de fluido originários da parede do fundo do canal com a renovação de superfície. O estudo relacionou o coeficiente de transferência de massa com a frequência de renovação da superfície e mostrou que a transferência de massa é controlada pelas grandes escalas.

Kumar et al. (1998) investigaram experimentalmente as estruturas turbulentas próximas à superfície livre em um canal aberto com número de Reynolds 2800 a 8800 usando PIV. Foram feitas medições das velocidades na direção longitudinal e transversal ao escoamento na superfície livre. Três tipos de estruturas próximas à superfície livre foram visualizados: as estruturas formadas pelos movimentos ascendentes do fluido, as estruturas formadas pelos movimentos descendentes do fluido e as estruturas espirais. Os vórtices frequentemente se mesclam quando rotacionam na mesma direção, mas em direções opostas formam pares, podendo ocorrer fusões ocasionais. Os vórtices espirais decaem lentamente e deixam de existir devido as estruturas formadas pelos movimentos ascendentes. Os resultados indicam que os movimentos ascendentes do fluido e as regiões de vórtices espirais dominam as taxas de transporte da grandeza escalar para altos números de Schmidt. O espectro de energia de uma dimensão do campo de fluxo na superfície livre

Janzen (2006) estudou a transferência de massa através da interface água-ar em de tanques de grades oscilantes. Dados obtidos experimentalmente foram comparados com soluções analíticas: energia cinética turbulenta, taxa de dissipação de energia e viscosidade turbulenta.

Foram obtidos dados de velocidade e concentração por PIV e LIF. As duas técnicas combinadas permitiram a obtenção do fluxo de massa através da interface. O autor observou que o problema do efeito da turbulência foi transferido da quantificação direta do coeficiente de transferência de massa para quantificação da espessura do filme formado sob a superfície. O coeficiente de transferência de massa é proporcional ao inverso da espessura do filme. A medida que a agitação aumenta, mais acelerado é o processo de transferência de massa, de onde pôde ser concluído, que a espessura do filme diminui com a turbulência e o coeficiente de transferência de massa aumenta. No estudo, mostrou-se que, na prática, o valor da concentração do seio do escoamento é alcançado rapidamente. O autor definiu a fronteira da camada limite de concentração  $\delta_c$  como o lugar geométrico dos pontos para os quais a diferença entre o valor de concentração em um ponto arbitrário e do seio do escoamento é igual a um por cento da diferença entre o valor da concentração na interface e do seio do escoamento. Foi estudada também a interação entre a turbulência gerada pelo fundo e a transferência de massa. As medições de concentração feitas variaram rapidamente de um valor na interface igual ao valor de saturação até o valor existente no seio do escoamento. O RMS da velocidade obtido foi grande próximo à interface e quase zero no seio do escoamento.

Muitos trabalhos são encontrados na literatura para a determinação experimental do coeficiente de transferência de massa de substâncias como os compostos orgânicos voláteis, entre eles: Cohen et al.(1978), Mackay e Yeun(1983), Chao et al.(2005), Cheng et al.(2005), Chao(2009) e outros.

Cohen et al. (1978) investigaram os coeficientes de transferência de massa na fase líquida em que os hidrocarbonetos são volatilizados a partir da solução aquosa em um tanque de laboratório. A velocidade do vento variou de zero a 11,6 m/s, com e sem agitação na água para simular turbulência. As velocidades do vento foram agrupadas em função do  $K_L$ : abaixo de 3 m/s, onde  $K_L$  é cerca de 3 cm / h, e é fortemente influenciado pela turbulência na água, de 3 a cerca de 10 m / s em que  $K_L$  é controlado pelas ondas induzidas pelo vento, e acima de cerca de 10 m / s em que ocorrem os chamados “carneiros”.

Mackay e Yeun (1983) estudaram as taxas de volatilização diferentes compostos orgânicos em um tanque de 6m, variando a constante da lei de Henry. Os coeficientes de transferência de massa obtidos foram comparados aos calculados pela teoria dos dois filmes e tiveram boa concordância. As correlações obtidas foram expressas em termos velocidade de fricção e do

número de Schmidt do composto no ar e na água. Os efeitos da velocidade do vento foram correlacionados com o coeficiente de transferência de massa, a difusividade de soluto e a temperatura. Os resultados sugeriram que os coeficientes de transferência obtidos pela teoria são geralmente inferiores aos medidos no laboratório.

McKenna e McGillis (2004) realizaram medições de velocidade de transferência de massa usando PIV. O divergente de superfície calculado a partir do campo de flutuação de velocidade livre foi relacionado com os dados de transferência de massa. As flutuações do campo velocidade foram obtidas usando PIV. Os autores concluíram que o divergente de superfície livre é um processo importante envolvido no transporte de massa.

Lee et al. (2004) estudaram os efeitos das propriedades dos solutos orgânicos nos processos de volatilização de soluções aquosas. Alto valor da constante da lei de Henry em um composto significa que o mesmo tem alta pressão de vapor, alta volatilização e baixa solubilidade. A resistência à transferência de massa é resultado da resistência à passagem através de dois filmes finos (gás e líquido) adjacentes à interface gás-líquido. Para os compostos orgânicos voláteis com alto valor de constante da lei de Henry, a resistência da fase gasosa é desprezível em comparação a fase líquida e a concentração de compostos na interface é maior na fase gasosa.

Cheng et al. (2005) estudaram o desenvolvimento e a viabilidade de um modelo de emissão de compostos orgânicos voláteis a partir de superfície líquida quiescente. Foi construído um túnel de vento para simular a emissão de compostos orgânicos voláteis. Para cada valor de velocidade do vento, a massa de composto transferida da fase líquida para fase gasosa foi calculada por gravimetria. Foram controladas durante cada experimento a concentração de equilíbrio, temperatura da água e velocidade do vento, para obter uma curva característica das taxas de emissão. Foi medida a taxa de emissão de vários compostos orgânicos voláteis dissolvidos na água residual da bacia de neutralização de uma estação de tratamento de efluentes da região para avaliar a aplicação do modelo em situações práticas.

Chao et al. (2005) estudaram um método para prever as taxas de volatilização dos compostos orgânicos em escoamentos turbulentos sob ação do vento. Os compostos de referência foram classificados de acordo com suas propriedades físico-químicas. Foram estudados os efeitos das condições de turbulência e das propriedades dos compostos nas taxas de volatilização. Foram mostrados os valores do coeficiente de transferência de massa global ( $K_{OL}$ ) para o benzeno puro

comparados com o benzeno misturado com outros solutos sob condições de turbulência da fase gasosa.

Chao (2009) analisou as perdas por volatilização do líquido puro e as taxas de volatilização de solutos orgânicos, com diferentes constantes da lei de Henry e sob ação da velocidade do vento, sem considerar efeitos da turbulência na fase líquida. Foram testados oito compostos orgânicos voláteis para o líquido puro e quarenta e uma constante da lei de Henry com solutos orgânicos divididos em grupos. A velocidade do vento variou de 0 a  $6 \text{ ms}^{-1}$ .

Desoutter et al. (2009) estudou a formação de filmes líquidos em paredes, comum em muitas aplicações, como refrigeradores de ar, torres de resfriamento, secagem processos ou injeção direta de motores à gasolina. A metodologia DNS foi empregada para estudar a interação entre um líquido de evaporação de filme e camada limite turbulenta criada nas proximidades de uma parede de um motor com injeção. O fluxo líquido no filme não é resolvido, apenas os seus impactos na camada limite de gás são estudados por meio da condição de contorno que reflete as propriedades da superfície do filme. O objetivo é dar uma compreensão detalhada e construir um modelo de camada limite acima da superfície do filme.

Santos et al. (2012) investigaram o coeficiente global de transferência de massa de sulfeto de hidrogênio em superfícies líquidas quiescentes. Os valores experimentais para esse coeficiente foram comparados com os valores previstos  $K_L$  calculados por três modelos de emissão diferentes, que são utilizados para determinar as taxas de volatilização em superfícies quiescentes. Segundo o estudo, a velocidade de fricção em uma faixa de 0,11 e 0,27 m/s tem pouca influência sobre o coeficiente global de transferência de massa.

Na presente seção foram revisados trabalhos que investigam escoamentos realizados em laboratório, com uso de técnicas tais como PIV, DPIV e LDA que determinam a distribuição da velocidade e flutuação de velocidade. Essa seção também abordou investigações de laboratório que objetivam a determinação de coeficientes de transferência de massa. Em geral, a aplicação desses experimentos é limitada às condições específicas nas quais o estudo foi desenvolvido e servem de base para a validação de simulações numéricas que, conforme visto, tem aplicação mais abrangente.

## 4 Metodologia de solução

O presente capítulo tem como objetivo apresentar a metodologia utilizada para investigar numericamente a emissão de compostos, tais como sulfeto de hidrogênio ( $\text{H}_2\text{S}$ ), em superfície quiescente, através do estudo da taxa de transferência de massa na fase líquida.

O capítulo é dividido em três Seções principais: (i) Modelagem matemática, (ii) Método numérico e (iii) Descrição das configurações estudadas. Na primeira seção são apresentadas as equações do modelo proposto que são resolvidas pelo método de volumes finitos, abordado de forma sucinta na Seção 4.2.

A descrição detalhada das configurações estudadas, tais como domínio, malha computacional e condições de contorno adotadas em todo o trabalho são descritas na seção final deste capítulo.

### 4.1 Modelagem Matemática

#### 4.1.1 Equações de governo

A presente discussão de transferência de massa não considerou aspectos físicos do fenômeno como: contaminação da superfície, variação da densidade e ondas superficiais. O efeito da deformação da superfície não é discutido, ou seja, é assumido que o deslocamento da superfície livre é pequeno quando comparado com a altura.

A superfície livre foi considerada quiescente e com deformação desprezível. O fluido é a água, considerado newtoniano e incompressível. A massa do composto dissolvido não altera a massa específica do fluido ( $\rho$ ).

Conservação de massa

$$\frac{\partial(u_i)}{\partial x_i} = 0$$

Eq. 4.1

Conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial(u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 4.2}$$

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} \quad \text{Eq. 4.3}$$

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

Conservação da espécie química

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(Cu_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{v}{Sc} \frac{\partial C}{\partial x_i} \right] \quad \text{Eq. 4.5}$$

onde  $C$  é a concentração do composto expressa em  $[\text{kgkg}^{-1}]$ .

#### 4.1.2 Modelagem da turbulência

As equações descritas nas seções anteriores não possuem solução analítica, mesmo na sua forma simplificada. Escoamentos turbulentos associam alta resolução espacial (malha muito refinada) e pequenos passos de tempo. Atualmente, as principais metodologias disponíveis para resolução destas equações são: DNS, LES e RANS.

A metodologia DNS resolve diretamente todas as escalas da turbulência nas equações de conservação, enquanto modelos RANS são baseados nas médias no tempo das equações de Navier-Stokes. LES resolve diretamente as grandes escalas. Estas escalas são responsáveis por grande parte do transporte de massa e quantidade de movimento. Essa característica dos modelos LES é um dos grandes atrativos do uso da técnica na modelagem da turbulência e em especial, nos estudos de transferência de massa.

O modelo LES tem sido aplicado a um número crescente de problemas de relevância na engenharia. Como já mencionado, essa metodologia permite o estudo de escoamentos turbulentos com valores de número de Reynolds compatíveis com a prática. Além disto, LES também torna possível a resolução de problemas de transferência de massa com grande número de Schmidt.

Na metodologia LES, as estruturas turbulentas transportadoras de energia são resolvidas diretamente da solução das equações filtradas e, apenas as menores estruturas são modeladas. O uso da LES pressupõe que as equações de Navier-Stokes sejam submetidas a um processo de filtragem. O filtro permite separar as grandes das pequenas escalas, ou escalas de submalha, as quais podem ser representadas por diferentes tipos de modelos.

#### 4.1.2.1 Equações de governo filtradas

Qualquer distribuição de uma função no tempo ou no espaço pode ser submetida a processos de filtragem, seja por meio de um filtro temporal ou filtro espacial. A ideia da metodologia LES é dividir a propriedade em filtrada e as flutuações em torno desse valor filtrado. Assim, é aplicado um filtro para a separação das escalas que serão resolvidas diretamente ( $\bar{u}$ ) das escalas de submalha que serão modeladas ( $\hat{u}$ ).

Na metodologia LES, define-se uma operação de filtragem espacial por meio de uma função filtro  $G(x, x', \Delta)$ .

$$\bar{\varphi}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x', \Delta) \varphi(x', t) dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad \text{Eq. 4.6}$$

sendo que  $\hat{\varphi}(x, t)$  é a função filtrada;  $\varphi(x, t)$  é a função original (não filtrada);  $\varphi(x', t)$  é a função representada na nova coordenada  $x'$ , onde as integrais são calculadas;  $\Delta$  é o comprimento de corte do filtro;  $x'$  representa a coordenada onde as operações envolvendo os integrandos no espaço são calculadas para cada tempo  $t$ .

As variáveis são supostas constantes no interior do volume de discretização. Nos casos em que a largura da banda do filtro utilizado é igual à da malha de discretização, o processo de filtragem se confunde com o processo de discretização utilizado no método dos volumes finitos. A definição do filtro de corte no espaço físico utilizado no método dos volumes finitos para o filtro *top-hat* ou filtro box é apresentada na Eq. 4.7.

$$G(x, x', \Delta) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta^3}, & \text{se } |x - x'| \leq \frac{1}{2} \Delta \\ 0, & \text{se } |x - x'| > \frac{1}{2} \Delta \end{cases} \quad \text{Eq. 4.7}$$

A largura de corte do filtro define as escalas resolvidas e modeladas. A solução mais comum é considerar a largura do filtro igual a malha computacional. Em problemas tridimensionais com células de tamanhos  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  a largura do filtro é calculada segundo a Eq. 4.8:

$$\Delta = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad \text{Eq. 4.8}$$

O sistema é assumido como linear, contínuo e invariante no tempo, com sinal de entrada  $\phi(x', t)$  e de saída  $\bar{\phi}(x, t)$ , descrito pela integral de convolução representada pela Eq. 4.6. O sinal  $\phi(x, t)$  conhecido, é a resposta do sistema a uma unidade de impulso.

Para calcular a saída de  $\bar{\phi}(x, t)$  no tempo  $t$ , primeiro o integrando  $G(x, x', \Delta)\phi(x', t)$  é calculado como uma função da nova coordenada  $x'$ . Depois a integral tripla é calculada, resultando na propriedade filtrada  $\bar{\phi}(x, t)$ .

A parte filtrada da função,  $\bar{\phi}(x, t)$ , é a variável que representa a propriedade na equação de governo. A operação de filtragem, divide o escoamento turbulento em grandes estruturas ou grandes escalas,  $\bar{\phi}(x, t)$ , e pequenas estruturas,  $\phi'(x, t)$ , que correspondem às escalas de submalha.

O processo de filtragem consiste na imposição da função descrita na Eq. 4.6 às equações de conservação. Através do processo de filtragem, as equações de conservação apresentam a forma das Equações Eq. 4.9 a Eq. 4.11. O símbolo  $\bar{\quad}$  indica que a propriedade foi filtrada.

Conservação de massa

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 4.9}$$

Conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right] \quad \text{Eq. 4.10}$$

Conservação da espécie química

$$\frac{\partial \rho \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \overline{u_i C})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{\nu}{Sc} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \right] \quad \text{Eq. 4.11}$$

O sistema de equações modela o transporte das variáveis  $u_i$  e  $C$ . Como não é possível a solução do termo  $\overline{u_i u_j}$ , e  $\overline{u_i C}$  que se apresentam na forma de produto filtrado, os termos são decompostos resultando na Eq. 4.12 e Eq. 4.13.

$$\overline{u_i u_j} = \overline{(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{u}_j + u'_j)} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} + \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i \bar{u}_j} + \overline{u'_i u'_j} \quad \text{Eq. 4.12}$$

$$\overline{u_i C} = \overline{(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{C} + C')} = \overline{\bar{u}_i \bar{C}} + \overline{\bar{u}_i C'} + \overline{u'_i \bar{C}} + \overline{u'_i C'} \quad \text{Eq. 4.13}$$

Introduzindo as definições: tensor cruzado  $C_{ij}$  e fluxo cruzado  $C_{\theta i}$ , do tensor e fluxo de Leonard  $L_{ij}$  e  $L_{\theta j}$  (Leonard 1974) e do tensor de Reynolds de submalha  $R_{ij}$  e fluxo turbulento de submalha  $q_{\theta i}$

$$\overline{C_{ij}} = \overline{\bar{u}_i u'_j} + \overline{u'_i \bar{u}_j} \quad \overline{C_{\theta i}} = \overline{u'_i \bar{C}} + \overline{\bar{u}_i C'} \quad \text{Eq. 4.14}$$

$$L_{ij} = \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j \quad L_{\theta j} = \overline{\bar{u}_i \bar{C}} - \bar{u}_i \bar{C} \quad \text{Eq. 4.15}$$

$$R_{ij} = \overline{u'_i u'_j} \quad q_{\theta i} = \overline{u'_i C'} \quad \text{Eq. 4.16}$$

Pode-se reescrever os termos não lineares como:

$$\overline{u_i u_j} = \bar{u}_i \bar{u}_j - (C_{ij} + L_{ij} + R_{ij}) \quad \overline{u_i C} = \bar{u}_i \bar{C} - (C_{\theta i} + L_{\theta i} + q_{\theta i}) \quad \text{Eq. 4.17}$$

A decomposição não resolve o problema, pois foram introduzidos novos termos que precisam ser modelados para que o sistema de equações e incógnitas possa ser resolvido. Este é o chamado fechamento da turbulência. De acordo com Shannan et al. (1975) os tensores cruzados ( $C_{ij}$ ) e de Leonard ( $L_{ij}$ ) podem ser desprezados para esquemas de transporte convectivo de até 2ª ordem. Como o esquema de interpolação do presente trabalho é de segunda ordem, esses efeitos serão negligenciados.

Na modelagem LES, o modelo SGS (*Sub Grid Scale*) ou modelo de submalha é usado para representar os efeitos das pequenas escalas não resolvidas do movimento do fluido nas equações que regem os movimentos das grandes escalas que são resolvidas. Existem 4 classes de modelos de submalha: viscosidade turbulenta, similaridade, mistos e dinâmicos. Neste trabalho, foi usado o modelo de submalha Smagorinsky dinâmico pelos bons resultados em estudos de transferência de massa através de interface líquida (Shen et al., 2001, Dong et al., 2003).

De acordo com McDonough (2007), o modelo Smagorinsky é o mais antigo de modelos SGS do LES. Esse modelo foi proposto em Smagorinsky (1963) e é baseado na hipótese do equilíbrio local entre a produção e a dissipação da energia cinética turbulenta. Considerando que o corte entre as escalas resolvidas e modeladas se situe na faixa inercial do espectro de energia, é assumido que a produção de energia por tensões de cisalhamento é igual a sua dissipação.

O modelo de Smagorinsky é fortemente dependente do valor da constante  $C_S$ . Germano et al. (1991) e Lilly (1992) introduziram um método para avaliar os coeficientes de escala da submalha utilizando as informações contidas no campo da propriedade turbulenta resolvida, permitindo variar  $C_S$  no espaço e tempo, passando a se ajustar automaticamente ao tipo de escoamento. Em contraste, a modelagem dinâmica propõe que a variável  $C_S$  seja calculada dinamicamente, tendo como base o modelo de Smagorinsky para o cálculo da viscosidade turbulenta.

A hipótese proposta por Boussinesq, baseia-se na analogia entre as tensões turbulentas e as tensões viscosas do escoamento laminar, onde assume-se as tensões turbulentas são também proporcionais a um coeficiente denominado de viscosidade turbulenta de submalha  $\nu_{t,SGS}$  e ao gradiente da velocidade média do escoamento. A viscosidade turbulenta não é uma propriedade do escoamento, devendo incorporar portanto parâmetros que caracterizem as tensões e fluxos turbulentos. Assim, a tensão turbulenta é definida pela Eq. 4.18.

$$\overline{u'_i u'_j} = R_{ij} = 2\nu_{t,SGS} S_{ij} \quad \text{Eq. 4.18}$$

onde  $S_{ij}$  é dado pela equação Eq. 4.19.

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 4.19}$$

#### 4.1.2.2 Modelo de submalha dinâmico

No modelo de submalha de Smagorinsky, a viscosidade turbulenta é assumida proporcional a escala de comprimento de submalha característica. O procedimento do modelo de submalha dinâmico consiste em aplicar um segundo filtro, chamado filtro de teste para as equações de conservação. O novo filtro de largura  $\bar{\Delta}$  tem largura maior que a largura do filtro original e múltiplo das dimensões da malha utilizada, tipicamente o dobro da largura  $\bar{\Delta}$ .

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq. 4.20}$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \right] \quad \text{Eq. 4.21}$$

$$\frac{\partial \rho \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \bar{u}_i \bar{C})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ D \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} - q_{\theta i} \right] \quad \text{Eq. 4.22}$$

onde  $\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \bar{u}_i \bar{u}_j$  e  $\bar{u}_i \bar{C} = \overline{u_i C} - q_{\theta i}$ . Aplicando-se o filtro  $\langle G \rangle$  de largura  $\langle \Delta \rangle > \bar{\Delta}$

$$\frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j} - \langle \tau_{ij} \rangle \right] \quad \text{Eq. 4.23}$$

Introduzindo o tensor das tensões relativas ao segundo filtro, tem-se:

$$T_{ij} = \langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle - \langle \bar{u}_i \rangle \langle \bar{u}_j \rangle \quad \text{Eq. 4.24}$$

Subtraindo-se Eq. 4.10 da Eq. 4.23 tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle - \langle \bar{u}_i \rangle \langle \bar{u}_j \rangle) = \frac{\partial}{\partial x_j} (T_{ij} - \langle \tau_{ij} \rangle) \quad \text{Eq. 4.25}$$

O tensor de Leonard global é então definido como descrito na Eq. 4.26

$$L_{ijG} = \langle \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle - \langle \bar{u}_i \rangle \langle \bar{u}_j \rangle = T_{ij} - \langle \tau_{ij} \rangle \quad \text{Eq. 4.26}$$

A Eq. 4.26 é conhecida como identidade de Germano. Essa equação relaciona as tensões turbulentas resolvidas  $L_{ijG}$ , as tensões de escala da submalha  $\tau_{ij}$  e as tensões do filtro teste  $T_{ij}$ . Essa identidade é usada na determinação do coeficiente dinâmico  $c(x, t)$

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{ij} = -2\nu \bar{S}_{ij} = -2c(x, t) \bar{\Delta}^2 |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \quad \text{Eq. 4.27}$$

De maneira análoga, as tensões turbulentas  $T_{ij}$  também são modeladas obtendo-se:

$$T_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} T_{ij} = -2c(x, t) \langle \bar{\Delta}^2 \rangle \langle \bar{S} \rangle \langle \bar{S}_{ij} \rangle \quad \text{Eq. 4.28}$$

onde  $\langle \bar{S}_{ij} \rangle$  é dado pela

$$\langle \bar{S}_{ij} \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \langle \bar{u}_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle \bar{u}_j \rangle}{\partial x_i} \right) \quad \text{Eq. 4.29}$$

Filtrando-se a Eq. 4.27 tem-se:

$$\langle \tau_{ij} \rangle - \frac{\delta_{ij}}{3} \langle \tau_{ij} \rangle = -2\nu \langle \bar{S}_{ij} \rangle = -2c(x, t) \bar{\Delta}^2 \langle |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \rangle \quad \text{Eq. 4.30}$$

O tensor global de Leonard descrito pela Eq. 4.26 pode ser descrito como:

$$L_{ijG} - \frac{\delta_{ij}}{3} L_{ijG} = -2c(x, t) M_{ij} \quad \text{Eq. 4.31}$$

onde,

$$M_{ij} = \langle \bar{\Delta}^2 \rangle \langle \bar{S} \rangle \langle \bar{S}_{ij} \rangle - \bar{\Delta}^2 \langle |\bar{S}| \bar{S}_{ij} \rangle \quad \text{Eq. 4.32}$$

A expressão para o cálculo do coeficiente dinâmico é obtida a partir da combinação de Eq. 4.26 e Eq. 4.32.

$$c(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{L_{ijG} M_{ij}}{M_{ij} M_{ij}} \quad \text{Eq. 4.33}$$

## 4.2 Método numérico

O método numérico e os esquemas de interpolação no espaço e no tempo usados na resolução das referidas equações as equações Eq. 4.9, Eq. 4.10 e Eq. 4.11 são detalhados nesta seção. Foi utilizado o código computacional comercial FLUENT versão 14.5 desenvolvido pela ANSYS. O código FLUENT utiliza o Método dos Volumes Finitos (MVF) para resolver as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e espécies químicas.

O MVF é uma técnica de discretização usada na solução do escoamento de fluidos. Esse método envolve a divisão do domínio computacional em volumes de controle. As equações diferenciais parciais são integradas ao longo de cada volume de controle e ao longo de um intervalo de tempo (entre  $t$  e  $t+\Delta t$ ). Esse procedimento gera um conjunto de equações algébricas a ser resolvido por um algoritmo de solução de sistemas lineares.

Uma descrição completa do método de volumes finitos é apresentada por Patankar (1980) e Versteeg e Malalasekera (2007). Os volumes de controle nos quais as equações de governo são integradas, no espaço e no tempo, estão ilustrados esquematicamente no detalhe da Figura 4.1.

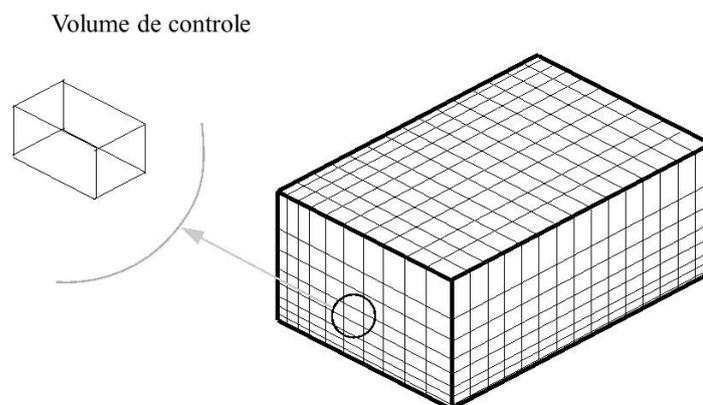


Figura 4.1 – Representação esquemática do domínio computacional discretizado pelo MVF

Para a solução do sistema algébrico foi usado o método *multigrid* (Hutchinson e Raithby, 1986), juntamente com o algoritmo Gauss-Seidel (Patankar, 1980). O método *multigrid* trabalha com uma faixa de malha, cada vez mais grossa, onde o erro é suavizado. Em cada nível de malha, os componentes do erro correspondente são reduzidos, acelerando o processo de convergência.

#### 4.2.1 Método de volumes finitos

Todas as equações de conservação têm a forma da equação Eq. 4.34, através da substituição apropriada de  $\phi$  que é a variável de interesse,  $\Gamma$  que é a difusividade associada a variável de interesse e de um termo genérico  $S_\phi = S_c + S_p\phi$ .

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\phi u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x_j} \right] + S_c + S_p\phi \quad \text{Eq. 4.34}$$

O método dos volumes finitos consiste em integrar a equação Eq. 4.34 em um volume de controle  $\forall$  limitado por uma superfície fechada  $S$ . Aplicando o teorema da Divergência de Gauss, obtém-se:

$$\int_{\forall} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} d\forall + \int_A \rho\phi u_j n_j dA = \int_A \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x_j} n_j dA + \int_{\forall} (S_c + S_p\phi) d\forall \quad \text{Eq. 4.35}$$

onde  $n_j$  é o vetor normal à superfície do volume de controle, apontando para fora do elemento e  $dA$  é a magnitude do elemento de área da superfície. Considerando um volume de controle  $i$  de  $N_i$  faces, obtém-se:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \forall_i \Big|_i + \sum_{j=1}^{N_i} (\rho u_j \phi n_j A)_f = \sum_{j=1}^{N_i} \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x_j} \Big|_i (n_j A) + (S_c + S_p)\phi \quad \text{Eq. 4.36}$$

onde  $f$  significa que a grandeza deve ser avaliada na face do volume de controle.

Os valores discretos do campo escalar são obtidos no centro do volume  $i$ . O somatório referente ao fluxo líquido convectivo da Eq. 4.36 pode ser reescrito obtendo-se a Eq. 4.37

$$\sum_{f=1}^{N_i} (\rho u_j \phi n_{jA})_f = \sum_{fA=1}^{N_A} \dot{m}_{fA} \phi_{fA} + \sum_{fB=1}^{N_B} \dot{m}_{fB} \phi_{fB} \quad \text{Eq. 4.37}$$

onde

$$\dot{m}_{fn} = (\rho u_n A)_f \quad \text{Eq. 4.38}$$

é o fluxo de massa que atravessa a face, sendo  $u_n$  a componente de velocidade normal à face  $f$  correspondem às faces onde os fluxos saem ( $f_A$ ) e entram ( $f_B$ ). Os valores de  $\phi_f$  são necessários nos termos nos termos advectivos da Eq. 4.37 e são interpolados através dos valores centrais do volume de controle  $\phi$ .

#### 4.2.1.1 Discretização espacial e temporal

Para a avaliação da variável  $\phi$  ao longo do volume de controle foi usado uma variante do esquema de interpolação de diferenças centrais denominado diferenças centrais limitado (*bounded central differencing*) (Leonard, 1991). O esquema de diferenças centrais descreve a variação de  $\phi$  entre dois pontos adjacentes da malha, baseado na influência do transporte convectivo e difusivo. O esquema de diferenças centrais, baseado na expansão da série de Taylor, apresenta precisão de 2ª ordem. O valor da variável na face do elemento é calculado conforme descrito na Eq. 4.39.

$$\phi_f = \frac{1}{2}(\phi_0 + \phi_1) + \frac{1}{2}(\nabla\phi_0 \vec{r}_0 + \nabla\phi_1 \vec{r}_1) \quad \text{Eq. 4.39}$$

sendo  $0$  e  $1$  referentes às células que compartilham a face  $f$ ,  $\nabla\phi_0$  e  $\nabla\phi_1$  são os gradientes calculados conforme equação Eq. 4.40.

onde

$$\nabla\phi_i = \frac{1}{V_i} \sum_{f=1}^{N_i} \phi_f A_f \vec{n}_f \quad \text{Eq. 4.40}$$

e  $\vec{r}$  é o vetor direcionado do centro do volume de controle à face correspondente do volume de controle.

O esquema de diferenças centrais descrito pela equação Eq. 4.39 apresenta baixa difusão numérica. De acordo com Patankar (1980), a difusão numérica é uma tendência de amortecimento ou suavização dos gradientes ou descontinuidades presentes na solução do problema. Esse efeito introduz erros, sendo portanto desejável um esquema em que esse efeito seja reduzido. O método de diferenças centrais limitado é baseado no diagrama das variáveis normalizadas (NVD - *normalized variable diagram*) (Zhu e Rodi, 1991).

Neste trabalho foi utilizada a discretização temporal de segunda ordem. A discretização temporal envolve a integração de todos os termos nas equações diferenciais ao longo de um passo de tempo  $\Delta t$ . Uma forma genérica para evolução temporal da variável  $\phi$  é dada pela equação Eq. 4.41.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = F(\phi) \quad \text{Eq. 4.41}$$

em que a função  $F(\phi)$  incorpora quaisquer discretizações espaciais.

A discretização temporal de segunda ordem é obtida a partir de uma expansão da série de Taylor, utilizando o instante de tempo presente  $n$ , passado  $n-1$  e futuro  $n+1$  é dada pela equação Eq. 4.42.

$$\frac{3\phi^{n+1} - 4\phi^n + 3\phi^{n-1}}{2\Delta t} = F(\phi) \quad \text{Eq. 4.42}$$

Uma vez discretizada a derivada temporal, apenas as posições temporais de  $\phi$  usadas para calcular  $F$ . No presente estudo, foram utilizadas integrações implícitas de segunda ordem (Eq. 4.42).

#### 4.2.1.2 Acoplamento pressão velocidade

As equações de quantidade de movimento introduzem uma nova dificuldade no procedimento de cálculo. Os termos convectivos das equações contêm quantidades não lineares, isto é, os coeficientes das equações discretizadas para  $u$ ,  $v$  e  $w$  dependem dos valores de  $u$ ,  $v$  e  $w$ . Assim, é necessário um processo iterativo para que a solução se torne possível. Além disso, o campo de velocidades é dependente do campo de pressões. Como o campo de pressões é desconhecido,

é necessário um método para calcular essa variável. Esses problemas são resolvidos neste trabalho com a utilização de uma estratégia de solução iterativa, denominada SIMPLEC.

Com o algoritmo SIMPLEC (*SIMPLE-Consistent*) a pressão é determinada de forma indireta a partir da equação da continuidade (Vandormaal e Raithby, 1984). O SIMPLEC é baseado no algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) descrito por Patankar (1980).

#### 4.2.2 Processamento paralelo

No presente trabalho, devido ao alto esforço computacional, as simulações computacionais foram realizadas em processamento em paralelo com memória distribuída. A Figura 4.2 apresenta a representação esquemática de um domínio computacional dividido em 16 subdomínios.

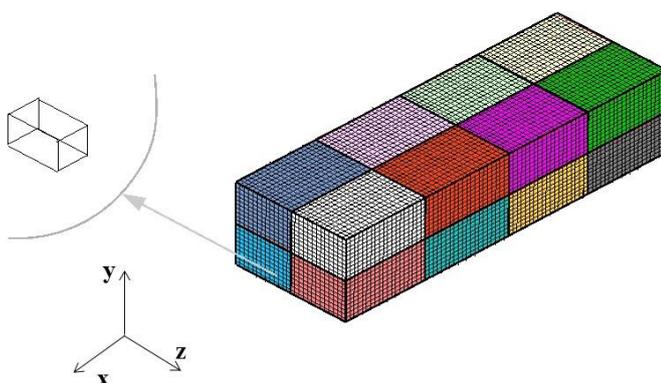


Figura 4.2 – Representação esquemática de domínio discretizado pelo método de volumes finitos em destaque o volume de controle

Cada subdomínio é atribuído a um nó. O mesmo código computacional é executado por todos os nós. Cada nó possui uma memória local e pode acessar a informação em outro nó usando um mecanismo de comunicação baseado em uma rede local. A velocidade desta rede impacta diretamente a velocidade de processamento. O processamento envolve: (i) divisão do domínio, (ii) execução das operações em cada nó sobre seu próprio conjunto de dados e (iii) comunicação dos dados entre os diversos nós. Assim, diferentes configurações foram utilizadas, dependendo do cálculo a ser realizado. A comunicação entre os diversos nós foi feita usando-se o protocolo

MPI (*Message Passing Interface*) (Chock e Carmichael, 2000). A se refere ao tempo de simulação para convergência das estatísticas do escoamento e posteriormente simulação da grandeza escalar e escoamento.

Tabela 4.1 ilustra os nós correspondentes aos subdomínios e o tempo de processamento total. O tempo de processamento total se refere ao tempo de simulação para convergência das estatísticas do escoamento e posteriormente simulação da grandeza escalar e escoamento.

Tabela 4.1 – Tempo de processamento total e número de núcleos das simulações realizadas

$Re$	$Sc$	Tempo de processamento total (dias)	Número de núcleos
150	1	10	1 nó x 8 núcleos
	200	12	1 nó x 8 núcleos
	580	15	1 nó x 8 núcleos
640	1	15	1 nó x 8 núcleos
	200	20	1 nó x 8 núcleos
	580	25	1 nó x 8 núcleos
1280	1	25	8 nós x 2 núcleos
	200	30	8 nós x 2 núcleos
	580	36	8 nós x 2 núcleos

### 4.3 Descrição das configurações estudadas

#### 4.3.1 Domínio computacional e condições de contorno

No presente trabalho é investigada a transferência de massa de compostos, dentre os quais um composto odorante (sulfeto de hidrogênio), em superfícies livres com deformação negligenciável. O estudo baseou-se em um escoamento totalmente desenvolvido de um canal aberto. A geometria é retangular de dimensões  $2\pi\delta$ ,  $\pi\delta$  e  $\delta$ , respectivamente, nas direções

longitudinal, transversal e normal ao escoamento, onde  $\delta$  é a altura do canal. As correspondentes componentes das velocidades são expressas por  $u, w$  e  $v$ . Os limites inferior e superior do domínio estão localizados em  $y = 0$  e  $y = \delta$ , respectivamente. O escoamento é considerado periódico nas direções longitudinal e transversal. O canal foi considerado com largura e comprimento suficientes para que os valores inicialmente impostos na entrada e na fronteira lateral direita fossem subsequentemente substituídos pelos valores na saída e fronteira lateral esquerda, em um processo repetitivo até que ambas as posições, apresentassem perfis idênticos para todas as variáveis, o mesmo acontecendo para paredes laterais. Assim, a condição de periodicidade imposta permite que, mesmo com dimensões consideravelmente menores, o domínio de cálculo seja representativo do todo.

A Figura 4.3 apresenta esquematicamente o domínio computacional e as condições de contorno do presente trabalho. As condições de contorno definidas para velocidade foram sem deslizamento (velocidade nula) no fundo e deslizamento livre (tensão de cisalhamento nula) no topo. Para o escalar (concentração), foram definidas condições de contorno igual a zero no limite inferior e igual à unidade no limite superior. Os campos de escoamento e concentração foram assumidos homogêneos ao longo da direção principal do escoamento ( $x$ ) e transversal ( $z$ ) para que as condições periódicas fossem impostas nos dois sentidos. A malha utilizada na simulação é uniforme nas direções longitudinal e transversal ao escoamento. Na direção normal, a malha é refinada perto da superfície livre e na parte inferior.

As condições de contorno periódicas para os componentes de velocidade nas seções de entrada e saída do domínio em  $x = 0$  e  $x = 2\pi\delta$  foram impostas a partir de um gradiente de pressão que estabelece o nível de velocidade em cada simulação. O gradiente de pressão imposto entre as duas fronteiras é igual a:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{\rho u_*^2}{\delta} \quad \text{Eq. 4.43}$$

onde  $u_*$  é a velocidade de fricção,  $\rho$  a massa específica e  $\delta$  é a altura do canal.

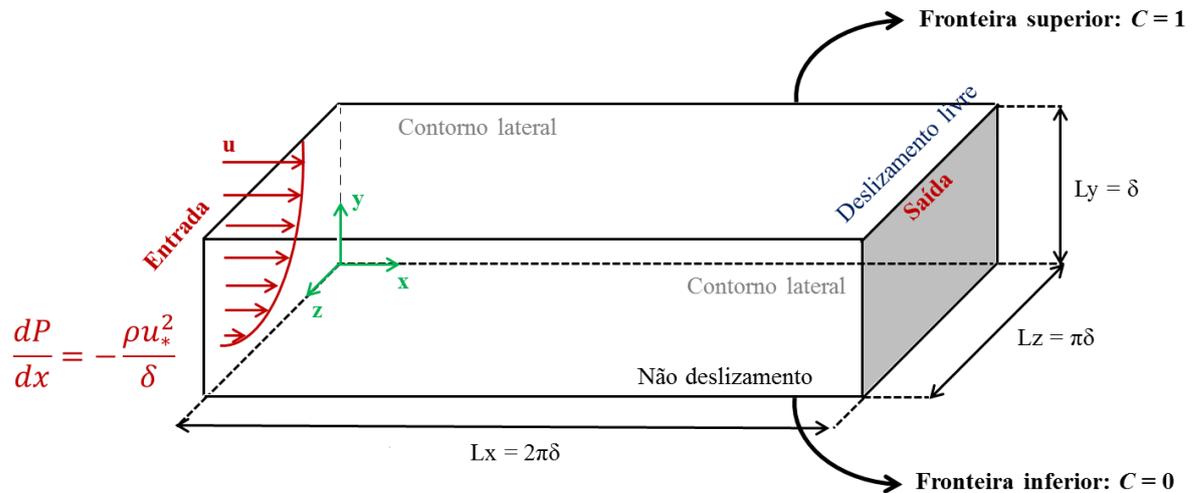


Figura 4.3 – Representação esquemática do domínio computacional e condições de contorno

Para cada número de Reynolds avaliado (baseado na velocidade de fricção), o número de pontos da malha utilizada foi modificado de modo a resolver adequadamente a produção de fluxo turbulento desenvolvido, próximo a parede do fundo e junto à superfície livre. Para cada número de Schmidt a malha foi refinada na direção normal próximo ao fundo e junto à superfície livre de tal forma que pelo menos três pontos fossem mantidos dentro da subcamada difusiva. O espaçamento dos pontos da malha na vertical é equidistante em relação a um eixo médio horizontal. O modelo matemático foi validado com dados de DNS obtidos na literatura a partir das quantidades médias e dos momentos estatísticos das variáveis envolvidas.

#### 4.3.2 Malha computacional

Como a quantidade de pontos do domínio varia de acordo com a quantidade de volumes de controle, à medida que a quantidade de volumes utilizados aumenta, a solução encontrada estará mais próxima da solução exata. Para  $Sc > 1$  as escalas de comprimento do campo escalar são menores do que as menores escalas de comprimento do campo de escoamento, resultando em requerimentos de malha diferentes para resolução do escoamento e para os campos escalares.

A medida em que o número de Reynolds aumenta, a resolução temporal e espacial deve aumentar significativamente. Similar à escala da turbulência, que descreve a menor escala de

comprimento a partir da qual que a viscosidade se torna dominante, a escala de Batchelor descreve a menor escala de comprimento, para o campo de concentração a partir da qual a difusão molecular se torna dominante. Estas duas escalas associadas definem o tamanho do elemento usado na discretização do domínio, que permite que as equações do modelo sejam resolvidas. O comprimento de escala de Kolmogorov tem de ser resolvido para o campo de escoamento e a escala de Batchelor de comprimento para o campo escalar. Isto significa que o cálculo do escoamento pode ser feito em uma malha mais grossa que o cálculo do escalar.

No presente estudo, dois critérios foram adotados: o primeiro deles relativo ao número de Reynolds baseado na velocidade de fricção (escoamento). Definido o domínio computacional, os valores de  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  foram calculados para cada número de Reynolds respeitando-se os valores estabelecidos por Jiang e Lai (2009). Jiang e Lai (2009) estabelecem faixas de valores típicos de tamanho de malha calculados em unidades de parede ( $\Delta x^+$ ,  $\Delta y^+$  e  $\Delta z^+$ ) para escoamento de camada limite turbulenta usando LES. O cálculo do tamanho adimensional da malha é feito de acordo com  $\Delta x_i^+ = \Delta x_i u^* / \nu$  onde  $\Delta x_i$  é o tamanho da malha na direção  $i$ .

O segundo critério refere-se ao número de Schmidt. A malha computacional definida para cada número de Reynolds foi refinada próxima ao topo e fundo. Enquanto, nas direções  $x$  e  $z$ , a malha é uniforme, na direção  $y$  foi feito um refinamento para que o cálculo da grandeza escalar fosse efetuado com acurácia. A distribuição  $y$  dos pontos da malha foi feita de modo que pelos menos, três pontos fossem mantidos dentro da subcamada difusora localizada abaixo da superfície livre.

No caso da simulação de validação do presente estudo, a malha utilizada é uniforme ao longo das direções longitudinal e transversal do escoamento. O domínio foi dividido em 77 pontos na direção longitudinal, 89 pontos na direção transversal e 62 pontos na direção transversal ao escoamento. A Figura 4.4 mostra o refinamento próximo à superfície livre, região onde se deseja que o escoamento seja mais bem predito devido ao cálculo da grandeza escalar necessária a determinação da taxa de volatilização do composto, objeto principal do presente estudo.

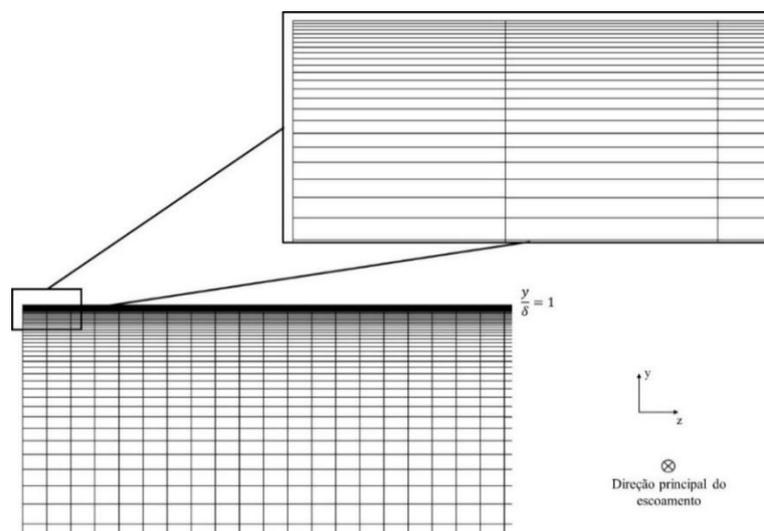


Figura 4.4 – Refinamento da malha próximo a superfície livre referente à simulação de  $Re = 1280$  e  $Sc = 580$ .

A Tabela 4.2 exibe a quantidade de pontos em cada direção da malha computacional para os números de Reynolds 150, 640 e 1280 simulados e número de Schmidt igual a 580. É possível notar que, maiores números de Reynolds demandem malhas mais refinadas, o que também ocorre para o número de Schmidt.

A malha é refinada na proximidade fronteira inferior (parede sólida) e fronteira superior (superfície livre). Os valores de  $y^+ = y \cdot u_* / \nu$  representam a distância em unidades de parede onde  $y$  é a coordenada vertical,  $u_*$  é a velocidade de fricção e  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido. Estes valores encontram-se detalhados na Tabela 4.2

Para os números de Schmidt 1, 200 e 580 foi usada uma malha não uniforme de pontos na direção normal, dependente do valor do número de Schmidt. Para  $Sc = 1$ , a distribuição é simétrica em relação ao plano médio de  $y = \delta/2$ , o menor espaçamento de malha  $y$  próximo a superfície e fundo, é tal que  $y^+ = y \cdot u_* / \nu \approx 0,01$ .

A espessura da subcamada difusora perto da superfície livre diminui fortemente nos casos em que o número de Schmidt aumenta, a parte superior da malha é refinada para maiores números de Schmidt. Por exemplo, na investigação do escoamento com número de Reynolds igual a 150 e número de Schmidt igual a 580, o mínimo espaçamento da malha foi reduzido para  $y^+ \approx 0,025$ .

Tabela 4.2 – Detalhamento da malha computacional

Nº de Reynolds (Re)	Número de pontos			$y^+$	Tamanho do elemento mínimo [m]
	Longitudinal	Normal	Transversal		
150	77	100	89	0,025	6,04E-05
640	77	120	89	0,036	2,03E-05
1280	77	140	140	0,043	1,21E-05

#### 4.4 Critérios de convergência estatística

Para tornar as condições de todas as simulações realizadas mais representativas das condições utilizadas nos estudos de referência de Nagaosa (1999) e de Nagaosa e Handler (2003), a evolução do RMS da velocidade foi criteriosamente acompanhada em vários pontos localizados em toda a extensão do domínio. A Figura 4.5 mostra o ponto N correspondente as estatísticas apresentadas na Figura 4.6.

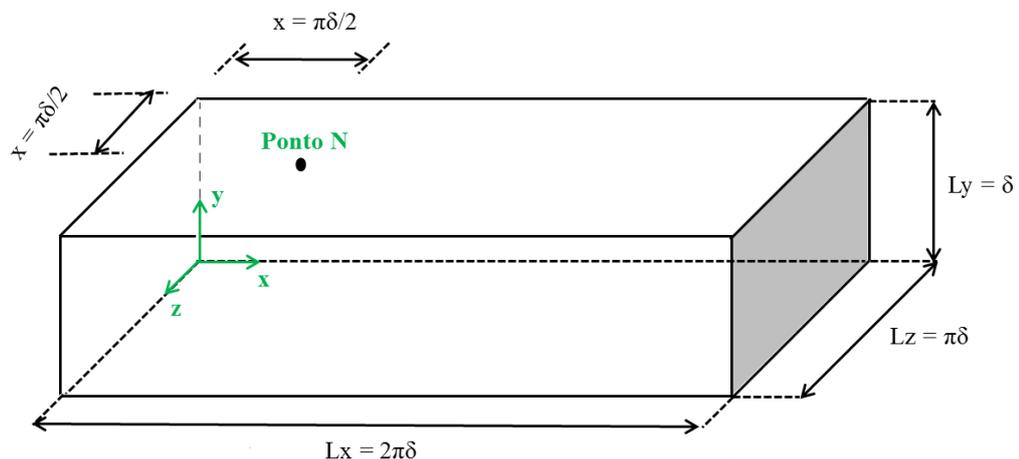


Figura 4.5 – Localização do ponto de monitoramento N no domínio computacional

As curvas exibidas na Figura 4.6 referem-se a séries temporais da estatística de RMS da velocidade na direção longitudinal para número de Reynolds igual a 150 e número de Schmidt igual a 580. Nas curvas são mostrados dois instantes da simulação referentes ao ponto N da Figura 4.5 nos quais o RMS da velocidade assume valor zero.

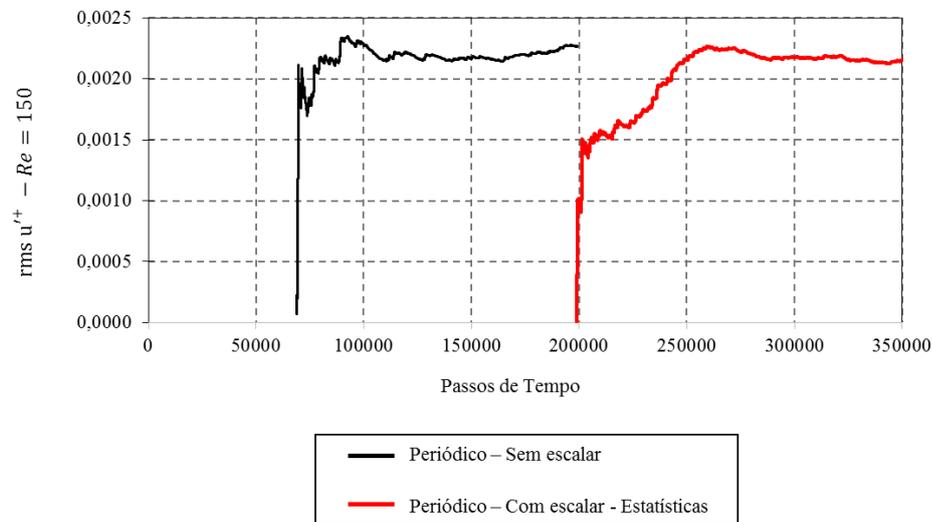


Figura 4.6 – Convergência das estatísticas da variável RMS de flutuação de velocidade longitudinal para os números de Reynolds simulados

Estes instantes correspondem ao início da amostragem temporal para estatística da variável e ao início da resolução da equação do transporte do escalar. Estes dois instantes estão distanciados de cerca de 120.000 (cento e vinte mil) passos de tempo. Também é possível observar nas Figuras que, o início do cálculo efetivo das estatísticas da variável, se deu somente após o valor de RMS (estatística monitorada), apresentar um comportamento de razoável estabilidade (variação aproximada de 5%).

Isto significa que as estatísticas mudam rapidamente quando se leva em conta um determinado número de realizações, mas tornam-se estáveis a partir de um determinado número, este número de realizações foi utilizado para todas as simulações.

Conforme o estudo de referência que simulou  $Re = 150$ , o cálculo das variáveis foi realizado durante 2700 unidades de tempo viscosos a fim de obter-se o escoamento totalmente desenvolvido, com um incremento de tempo de 0,0225 unidades de tempo viscosos. Cada unidade de tempo viscoso equivale a  $t^+ = t \cdot u_*^2 / \nu$  onde  $t$  é o tempo,  $u_*$  é a velocidade de fricção e  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido. Este instante foi respeitado para a simulação atual LES para o  $Re = 150$  porém foi verificado que para os demais números de Reynolds esse período de tempo não foi suficiente para a convergência estatística da variável monitorada. Os tempos utilizados para cada simulação estão apresentados na Tabela 4.3. Cada número de

Reynolds (baseado na velocidade de fricção) tem seu equivalente passo de tempo e o tempo total de simulação.

Tabela 4.3 – Passos de tempo e tempo de processamento das simulações realizadas

$Re$	$Sc$	Passo de tempo da simulação (s)	Tempo adimensional de simulação para resolver escoamento	Tempo adimensional de simulação para média após inserção de escalar
150	1	0,0036	2700	2700
	200	0,0036	2700	2700
	580	0,0036	2700	2700
640	1	0,0002	4500	4500
	200	0,0002	4500	4500
	580	0,0002	4500	4500
1280	1	0,00005	6000	6000
	200	0,00005	6000	6000
	580	0,00005	6000	6000

## 5 Resultados e discussões

O presente capítulo apresenta três seções principais: (i) detalhamento das simulações realizadas, (ii) validação do modelo matemático e (iii) resultados e discussões das simulações numéricas do transporte do escalar considerando variações nos principais parâmetros governantes (número de Reynolds e número de Schmidt).

Após o detalhamento de todas as simulações realizadas, é apresentada na segunda seção, a validação dos resultados por meio da comparação com resultados de DNS obtidos da literatura. Os dados comparados incluem valores médios das principais propriedades do escoamento e do transporte da grandeza escalar assim como parâmetros característicos de turbulência.

A terceira seção apresenta a análise da influência da variação do número de Reynolds (150, 640 e 1280) baseado na velocidade de fricção e número de Schmidt (1, 200 e 580). O número de Schmidt igual a 580 representa um composto odorante de grande interesse na engenharia ambiental.

### 5.1 Detalhamento das simulações realizadas

Os detalhes das simulações realizadas são apresentados na Tabela 5.1. Cada simulação está identificada pelo número de Reynolds (baseado na velocidade de fricção) e pelo número de Schmidt (baseado na difusividade do composto estudado). Assim, a simulação Re150Sc1 correspondente ao caso base, refere-se a um número de Reynolds igual a 150 e número de Schmidt igual a 1. Este caso será detalhado na Seção 5.3. O número de Reynolds é calculado como  $Re = u_* \delta / \nu$  onde  $\nu$  é a viscosidade cinemática do composto e  $u_*$  e  $\delta$ , respectivamente, a velocidade de fricção e a altura do canal. O número de Schmidt é calculado como  $Sc = \nu / D$  sendo  $D$  a difusividade do composto dissolvido na água.

Os resultados apresentados são normalizados em função da velocidade de fricção e do fluxo da grandeza escalar na superfície sólida (contorno inferior do domínio). A velocidade de fricção e o fluxo turbulento são dados pela Eq. 5.1 e pela Eq. 5.2, respectivamente.

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_*}{\rho}} \quad \text{Eq. 5.1}$$

onde  $\tau_*$  é a tensão de cisalhamento no fundo e  $\rho$  é a massa específica do fluido e  $q$  é dado pela

$$q = -\langle v' C' \rangle + D \frac{dC}{dy} \quad \text{Eq. 5.2}$$

onde  $\langle v' C' \rangle$  é o valor médio do produto da flutuação da velocidade na direção normal ( $v'$ ) e da flutuação da grandeza escalar ( $C'$ ),  $D$  é a difusividade do composto e  $dC/dy$  é o gradiente da concentração na direção normal ao escoamento.

Essa é a mesma normalização utilizada por Nagaosa (1999) e Nagaosa e Handler (2003) para permitir uma comparação direta entre os resultados. Assim, os valores de velocidade são normalizados pela velocidade de fricção e os valores de concentração são normalizados por  $q$  conforme as formulações expressas na Eq. 5.3 e na Eq. 5.4.

$$u_i^+ = \frac{u_i}{u_*} \quad \text{Eq. 5.3}$$

onde  $u_i$  é a componente de velocidade na direção  $i$  ( $i=1,2,3$ ) e os valores de  $C^+$  são dados por:

$$C^+ = \frac{C}{C_*} \quad \text{Eq. 5.4}$$

onde  $C$  é a grandeza escalar e  $C_*$  é definido por  $C_* = q/u_*$ .

Os números de Reynolds estudados (150, 640 e 1280) correspondem, respectivamente, aos números de Reynolds iguais a 2300, 11400 e 22800 calculados com base na velocidade média do seio do escoamento ( $u_m$ ) e na altura do canal ( $\delta$ ). Com relação aos números de Schmidt, os compostos referentes a  $Sc=200$  e  $Sc=580$  equivalem ao Hélio e ao sulfeto de hidrogênio ( $H_2S$ ), respectivamente. Como dito anteriormente, o sulfeto de hidrogênio é um importante composto odorante presente em estação de tratamento de esgoto (ETE). O composto usado nas simulações de validação e do caso base ( $Sc=1$ ) não corresponde a nenhum composto específico dissolvido em água. Entretanto, o uso do número de Schmidt igual a unidade no presente trabalho e em

outros aqui referenciados permitiu que detalhes importantes do processo de transferência de massa fossem investigados e que a validação do modelo matemático fosse realizada.

Neste estudo, foi investigada a transferência de massa na volatilização de compostos, tais como sulfeto de hidrogênio (H<sub>2</sub>S), em superfície líquida quiescente a partir do cálculo do coeficiente de transferência de massa na fase líquida. As simulações foram realizadas utilizando-se LES com modelo de submalha dinâmico. Os parâmetros governantes do fenômeno foram modificados em cada simulação realizada a fim de permitir o estudo de seus efeitos na taxa de transferência de massa. Ao todo foram realizadas nove simulações, combinando-se o número de Reynolds (escoamento) e número de Schmidt (transporte do escalar) como sumarizado na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Identificação das simulações realizadas

Sc \ Re	150	640	1280
1	Re150Sc1	Re640Sc1	Re1280Sc1
200	Re150Sc200	Re640Sc200	Re1280Sc200
580	Re150Sc580	Re640Sc580	Re1280Sc580

## 5.2 Validação da modelagem matemática

Os trabalhos de Nagaosa (1999) e Nagaosa e Handler (2003) que utilizaram DNS foram simulados a fim de permitir a validação do modelo matemático e a solução numérica empregada neste trabalho. Foram comparados resultados típicos de estatísticas da turbulência obtidos com LES com os resultados de DNS. Não existe na literatura dados experimentais dos casos investigados nesta tese para validação.

As simulações de Nagaosa (1999) e Nagaosa e Handler (2003) compreendem um canal aberto com domínio computacional  $Lx = 2\pi\delta$ ,  $Lz = \pi\delta$  e  $Ly = \delta$  onde  $\delta$  é a altura do canal. Os limites inferior e superior do domínio estão localizados em  $y = 0$  e  $y = \delta$ , respectivamente. O número de Reynolds de fricção (baseado na velocidade de fricção na parede do fundo) é igual a 150. A malha utilizada contém 77x62x89 pontos nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  (longitudinal, normal e transversal ao escoamento). O campo de concentrações de escalar usado para a validação no

presente trabalho é apresentado em Nagaosa e Handler (2003) a partir do escoamento desenvolvido por Nagaosa (1999). Para a validação do problema foi construído no centro do domínio um perfil vertical onde foram analisados dados médios de velocidade, da grandeza escalar e as estatísticas da turbulência.

Em todos os perfis apresentados na presente seção, a abscissa  $y^+ = y.u_*/\nu$  representa a distância vertical a partir da parede inferior em unidades de parede onde  $y$  é coordenada vertical,  $u_*$  é a velocidade de fricção e  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido. A quantidade RMS (*root mean square*) apresentada nesta seção equivale ao desvio padrão da variável de interesse ( $\phi$ ) calculada conforme descrito na Eq. 5.5:

$$rms \phi' = \sqrt{(\phi'^2)} \quad \text{Eq. 5.5}$$

Os gráficos apresentados da Figura 5.1 a Figura 5.5 compreendem as comparações de validação da modelagem LES. Nesses gráficos estão apresentados perfis verticais das variáveis do escoamento e da grandeza escalar e suas estatísticas (média e RMS, por exemplo).

A Figura 5.1 apresenta dados de velocidade longitudinal média no perfil vertical localizado no centro do domínio.

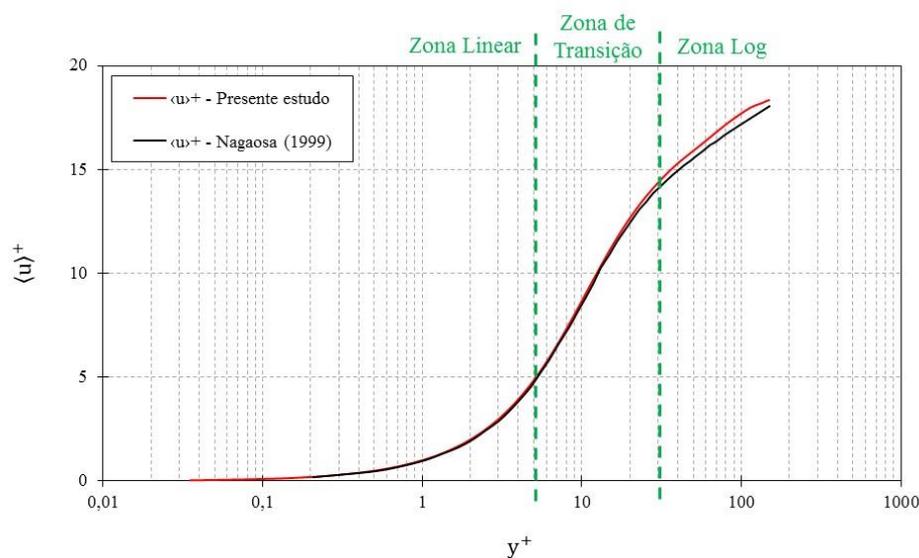


Figura 5.1 – Perfil vertical de velocidade longitudinal média

O eixo das abcissas está apresentado em escala logarítmica para melhor visualização das diferentes zonas do escoamento. Uma análise da Figura 5.1 permite identificar que o escoamento médio tem boa concordância com o resultado de Nagaosa (1999) indicando convergência do perfil médio do escoamento.

Adicionalmente, pode-se observar nesse perfil adimensional duas zonas típicas de um escoamento turbulento plenamente desenvolvido em um canal aberto de seção retangular. A camada viscosa estende-se até aproximadamente  $y^+ = 5$ . Nesta camada, os efeitos da viscosidade são consideravelmente mais importantes que os efeitos da turbulência. O perfil apresenta uma forma linear, ou seja,  $y^+ = u^+$ . Entre  $y^+ = 5$  e  $y^+ = 30$  pode-se observar uma zona de transição entre os perfis linear e logarítmico. Essas duas últimas regiões estão em perfeita concordância com o estudo DNS de referência. A partir de  $y^+ \approx 30$  o perfil assume a forma logarítmica até o topo do domínio conforme descrito por Pope (2000). Nessa região, o modelo superestima ligeiramente o valor da velocidade. O erro máximo encontrado entre os dois perfis é de aproximadamente 1,5%.

A Figura 5.2 mostra os perfis verticais dos valores de RMS da flutuação da velocidade onde  $rms u'^+ = rms u' / u_*$ ,  $rms v'^+ = rms v' / u_*$  e  $rms w'^+ = rms w' / u_*$  sendo  $rms u'$ ,  $rms v'$  e  $rms w'$  os valores de RMS das flutuações da velocidade nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento, respectivamente calculadas pela Eq. 5.5.

A evolução dos perfis de RMS da flutuação da velocidade nas três direções tem boa concordância com os estudos numéricos de Nagaosa (1999). O valor e a posição vertical do máximo RMS da flutuação longitudinal são bem próximos. A identificação adequada desse pico é importante porque indica a região de máxima de produção de turbulência. As componentes de RMS da flutuação da componente velocidade nas direções longitudinal e transversal ao escoamento diminuem na proximidade da superfície livre enquanto, o valor de RMS da componente da flutuação da velocidade normal tem ligeiro aumento a partir de  $y^+ \approx 130$ .

Nas duas curvas (validação e presente estudo), o pico de RMS da flutuação de velocidade longitudinal se localiza em  $y^+ \approx 15$  havendo uma diferença de 5,6% entre os valores máximos. A medida que se avança verticalmente em direção a superfície livre passando pelo seu máximo, o valor de RMS da flutuação da componente longitudinal da velocidade decai até estabilizar

em  $rms u'^+ = 1$  mostrando uma ótima predição do modelo de turbulência na superfície livre onde está investigado o transporte da grandeza escalar.

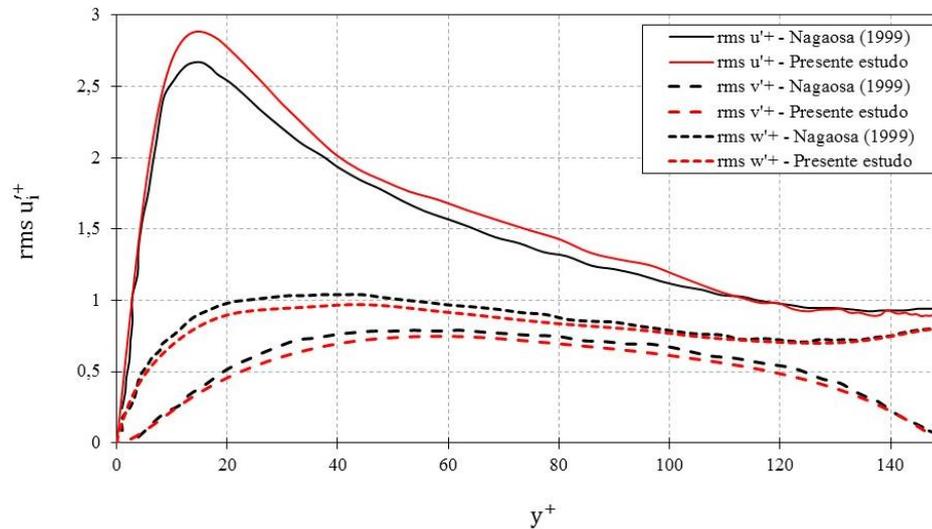


Figura 5.2 – Perfis verticais de RMS da flutuação da velocidade nas direções longitudinal, vertical e transversal

Nas outras duas direções, os perfis de referência e os perfis obtidos pela simulação LES são aproximadamente coincidentes com uma leve subestimativa. A flutuação da velocidade vertical praticamente se extingue na superfície livre devido a condição cinemática imposta no contorno superior para essa variável, isto é, velocidade vertical nula.

A Figura 5.3 ilustra os perfis de RMS da flutuação da vorticidade nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento. Nos gráficos,  $rms \omega_x'^+ = rms \omega'_x \cdot \nu / u_*^2$ ,  $rms \omega_y'^+ = rms \omega'_y \cdot \nu / u_*^2$  e  $rms \omega_z'^+ = rms \omega'_z \cdot \nu / u_*^2$  onde  $rms \omega'_x$ ,  $rms \omega'_y$  e  $rms \omega'_z$  são os valores de RMS da flutuação da vorticidade, respectivamente, nas direções longitudinal, normal e transversal ao escoamento,  $u^*$  a velocidade de fricção e  $\nu$  a viscosidade cinemática da água.

Os perfis de RMS da flutuação da vorticidade coincidem de forma razoável com os estudos numéricos de Nagaosa(1999). Igualmente ao observado por Calmet e Magnaudet (2003), as três componentes de flutuação da vorticidade são bastante similares na região mais afastada da parede. Isso sugere a isotropia da turbulência na região.

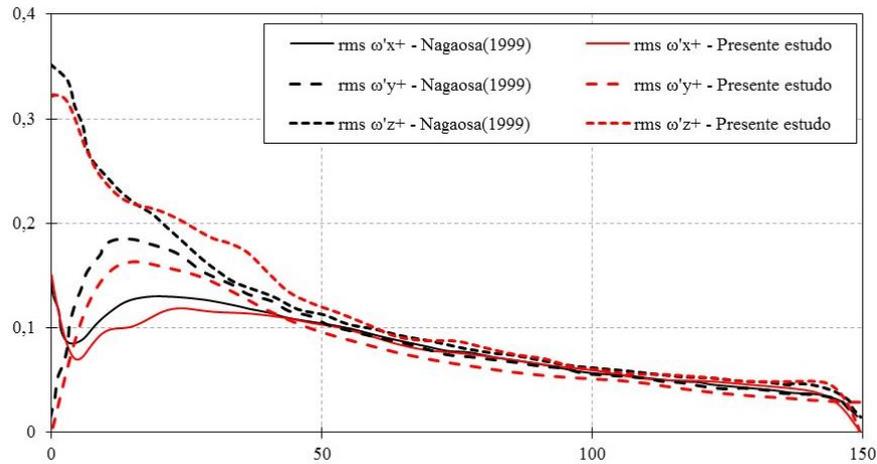


Figura 5.3 – Perfis verticais de RMS da flutuação de vorticidade nas direções longitudinal, vertical e transversal.

A produção de vórtices ocorre de forma similar nos valores de RMS da flutuação das três componentes de velocidade. Após  $y^+ \approx 50$  o mesmo decaimento de produção de vórtices é observado nas três direções. Nas proximidades da parede inferior a maior produção de vorticidade ocorre principalmente na direção transversal ( $rms \omega_z'^+$ ) se igualando as outras componentes em  $y^+ \approx 50$

O valor de  $rms \omega_z'^+$  indica a produção de vórtices referente a componente transversal que é calculada como  $\omega_z' = \partial u' / \partial y - \partial v' / \partial x$  mostrando que esse valor é dependente do gradiente vertical da velocidade longitudinal que é notadamente máximo próximo a parede. No que se refere ao valor de RMS da flutuação da velocidade normal ( $rms \omega_y'^+$ ), o seu máximo ocorre em  $y^+ \approx 15$ . Essa elevada produção de vórtices com tendência de variar as velocidades longitudinal e transversal  $\omega_y' = \partial u' / \partial z - \partial w' / \partial x$ . Pode-se fazer uma análise conjunta com a Figura 5.2 que mostra o pico de produção de turbulência longitudinal na mesma distância vertical  $y^+ \approx 15$ .

A Figura 5.4 mostra o perfil vertical de uma componente do tensor das tensões de Reynolds normalizado, onde  $\langle u'v' \rangle^+ = \langle u'v' \rangle / u^{*2}$  e  $\langle u'v' \rangle$  é a média no tempo do produto da flutuação da velocidade longitudinal ( $u'$ ) e da flutuação da velocidade normal ( $v'$ ), respectivamente.

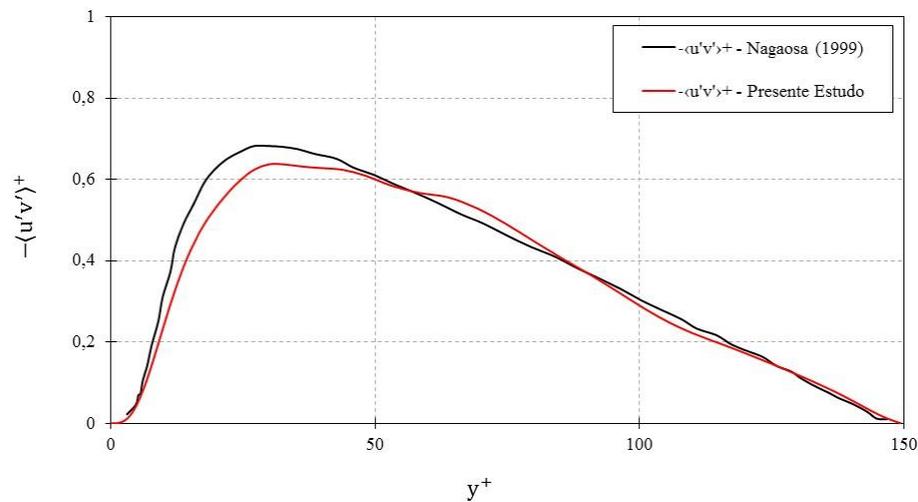


Figura 5.4 – Perfil vertical da componente  $u'v'$  do tensor de Reynolds.

A correlação das flutuações das componentes das velocidades vertical e longitudinal está associada a interpretação física do transporte vertical da quantidade de momento longitudinal. O máximo desse transporte ocorre em  $y^+ \approx 15$ . Isso se reflete nos gráficos da Figura 5.2 em que a produção de turbulência longitudinal é também máxima. Esse transporte decai com a altura do canal conforme pode ser notado na Figura 5.4.

A Figura 5.5 mostra o perfil de viscosidade turbulenta  $\nu_t^+ = \nu_t/\nu$  onde  $\nu_t$  é a viscosidade turbulenta dada por  $\nu_t = -\langle u'v' \rangle / (\partial u / \partial y)$  e  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido.  $\langle u'v' \rangle$  representam a componente do tensor de Reynolds que é a média do produto das flutuações das velocidades nas direções longitudinal e normal do escoamento. O perfil obtido pelo presente estudo apresenta excelente concordância com o perfil do estudo de referência em todo o domínio.

Devido à sua importância na caracterização da forma da curva de probabilidade de densidade é interessante definir os terceiro e quarto momentos, respectivamente,  $S(\phi)$  que é o *skewness* (assimetria) e o  $F(\phi)$  é o *flatness* (curtose ou achatamento). A quantidade  $S(\phi)$  apresentada da variável de interesse  $\phi$  é calculada conforme a Eq. 5.6 e a quantidade  $F(\phi)$  da variável de interesse é calculada pela Eq. 5.7.

$$S(\phi) = \overline{\phi^3} / (\overline{\phi^2})^{3/2} \quad \text{Eq. 5.6}$$

$$F(\phi) = \overline{\phi^4} / (\overline{\phi^2})^2 \quad \text{Eq. 5.7}$$

Os gráficos da Figura 5.6 (a) e Figura 5.7 (a) exibem, respectivamente, os perfis verticais do *skewness* e *flatness* das componentes de velocidade, construídos no centro do domínio.

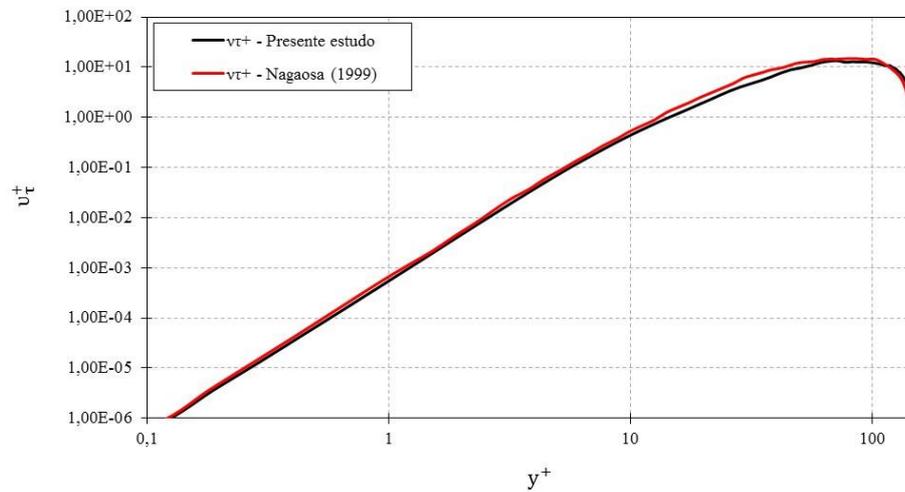


Figura 5.5 – Perfil vertical de viscosidade turbulenta normalizada

As curvas mostradas na Figura 5.6 (a) obtidas pelo presente trabalho e pelo estudo de referência possuem boa concordância, em especial, na região próxima à superfície livre. Na região próxima à parede inferior observa-se uma maior discrepância entre o resultado de *skewness* predito pelo modelo e pelas simulações de referência DNS. Isso pode ser atribuído a diferenças de malha ou do tempo de média utilizado.

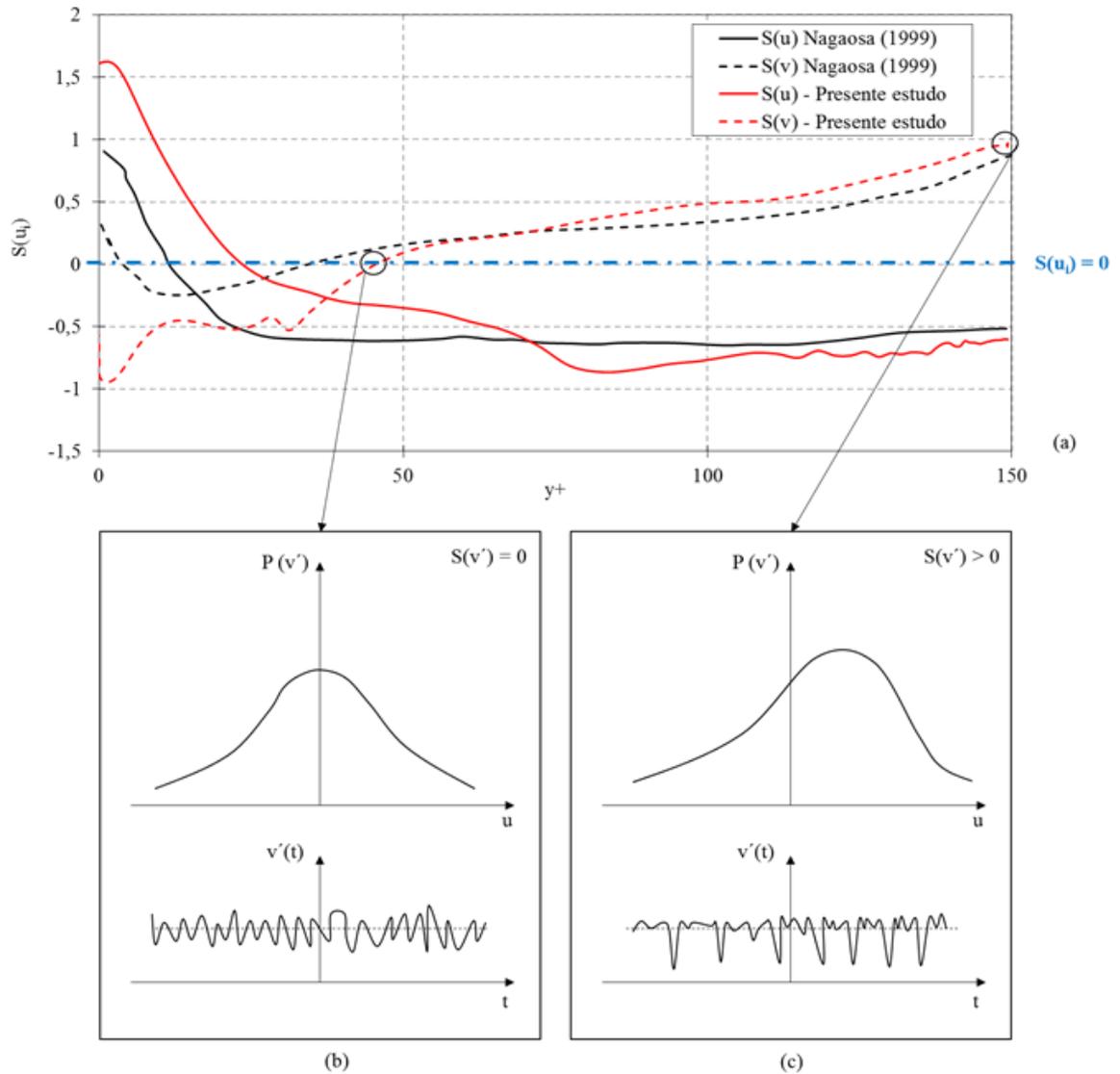


Figura 5.6- Perfil vertical do *skewness* das componentes de velocidade (a) perfil de validação, (b) representação esquemática da função probabilidade de densidade em  $y^+ \sim 45$  e (c) representação esquemática da função probabilidade de densidade em  $y^+ \sim 150$ .

Os detalhes da Figura 5.6 (b) e Figura 5.6 (c) são representações esquemáticas da quantidade *skewness* mostrando a função densidade de probabilidade da velocidade em dois pontos distintos do domínio localizados em  $y^+ \approx 45$  e em  $y^+ \approx 150$ , respectivamente. Do mesmo modo, os detalhes da Figura 5.7 (b) e Figura 5.7 (c) são representações esquemáticas da quantidade *flatness* mostrando a função densidade de probabilidade da velocidade em dois pontos distintos do domínio localizados em  $y^+ \approx 45$  e  $y^+ \approx 150$ , respectivamente.

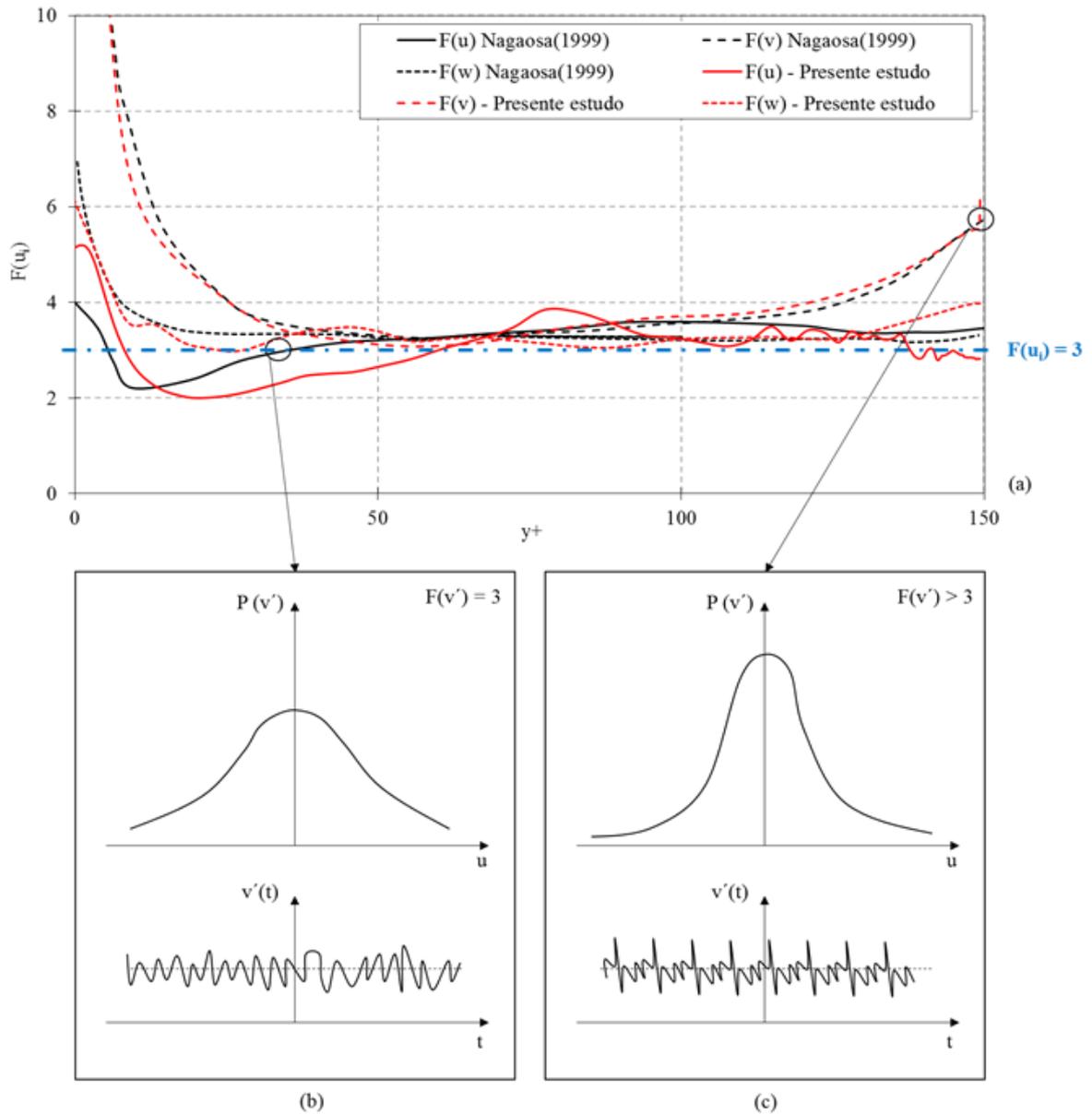


Figura 5.7- Perfil vertical do *flatness* das componentes de velocidade (a) perfil de validação, (b) representação esquemática da função probabilidade de densidade em  $y^+ \sim 45$  e (c) representação esquemática da função probabilidade de densidade em  $y^+ \sim 150$ .

A linha azul demarcada no gráfico refere-se a distribuição normal e tem o valor do *skewness* igual a zero. O ponto referente à imagem da Figura 5.6 (b) foi escolhido porque ilustra a condição nula do valor do *skewness*. Pode ser observado pela representação esquemática que a função densidade de probabilidade é simétrica no ponto. Com relação ao ponto referente a Figura 5.6 (c) a escolha foi feita porque está localizado junto à superfície livre e tem valor do *skewness* positivo e igual a 0,5. Além disto, a condição ilustra a ocorrência de um importante

processo. Conforme mostrado na Figura 5.6 (c), quando a função probabilidade de densidade é assimétrica com valores de *skewness* positivos conforme pode ser visualizado no detalhe esquemático, existe uma predominância de flutuações negativas indicando a intermitência do processo de renovação de superfície.

As curvas mostradas na Figura 5.7 (a) obtidas pelo presente trabalho e pelo estudo de referência possuem boa concordância, em especial, na região próxima à superfície livre. É possível notar que, a linha em azul referente a distribuição normal tem quantidade *flatness* igual a 3. O ponto referente à imagem da Figura 5.7 (b) foi escolhido porque ilustra condição nula de valor do *flatness*. Nesta condição pode ser observado que a função probabilidade de densidade é simétrica e menos achatada. O ponto referente a Figura 5.7 (c) localizado junto à superfície livre e tem valor do *flatness* positiva e igual a 5.

A Figura 5.8 exibe o perfil da concentração média normalizada, representado por  $C^+ = \langle C \rangle / C_*$ .

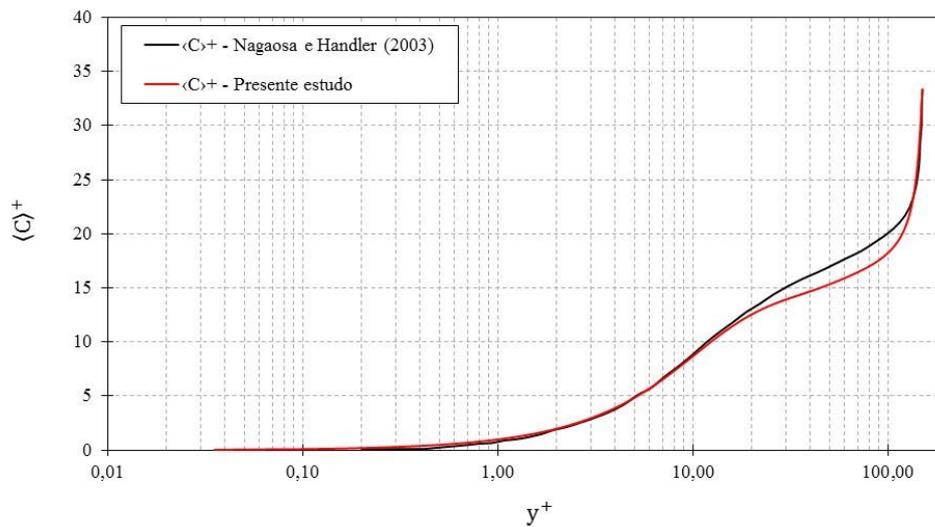


Figura 5.8 – Perfil vertical de concentração média normalizada

Os perfis encontrados pelo presente estudo encontram-se com excelente acordo em toda a altura do canal com os dados de DNS do estudo de Nagaosa e Handler (2003). Somente uma ligeira diferença é observada na faixa de  $y^+$  entre 30 e 100. A região bem próxima a superfície livre (por exemplo,  $y^+ > 125$ ) os perfis são perfeitamente coincidentes.

O perfil vertical do fluxo turbulento  $\langle v'C' \rangle$  de um canal é indicado pela média do produto da flutuação da concentração ( $C'$ ) e da flutuação da componente vertical da velocidade ( $v'$ ). A Figura 5.9 apresenta esse perfil normalizado por  $q$  dado pela Eq. 5.2.

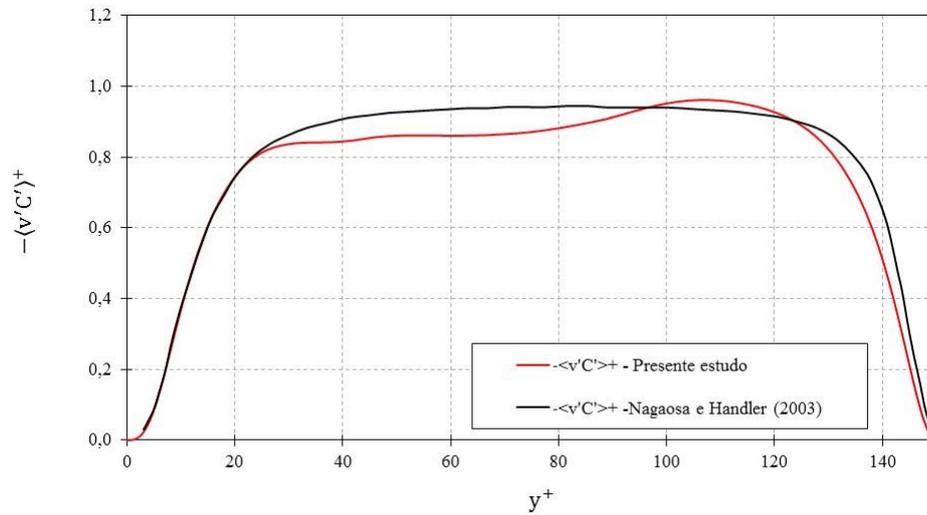


Figura 5.9 – Perfil vertical do fluxo turbulento do escalar

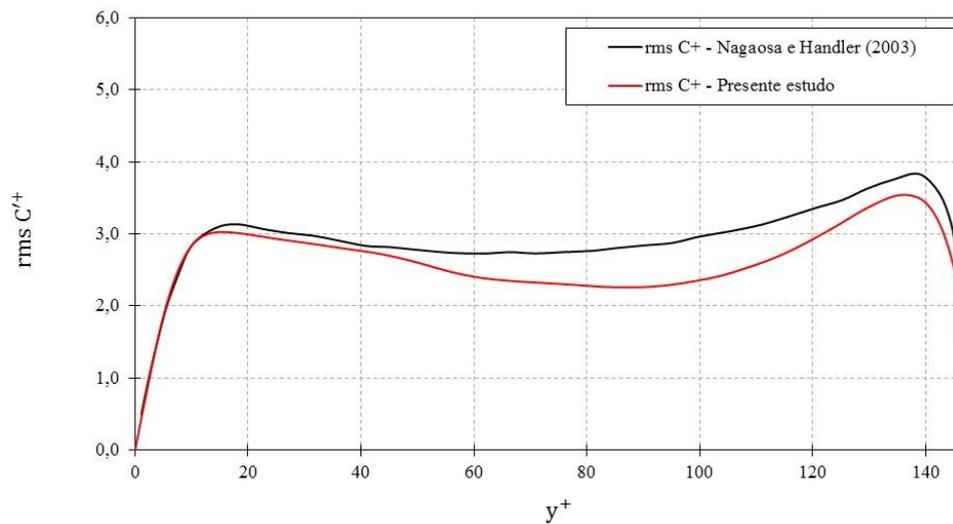


Figura 5.10 – Perfil vertical do RMS da flutuação da concentração do escalar

Os valores mostrados no gráfico da Figura 5.9 referem-se ao fluxo turbulento da grandeza escalar. É importante notar que com base nessa normalização, a variável  $\langle v'C' \rangle^+$  representará

a relação entre os fluxos turbulentos e fluxo por difusão molecular. Caso o fluxo turbulento seja muito maior que o fluxo molecular  $\langle v' C' \rangle^+ \rightarrow 1$ , caso o fluxo por difusão molecular seja dominante  $\langle v' C' \rangle^+ < 1$  tende a zero.

Esse gráfico confirma a teoria quanto a prioridade do transporte difusivo em relação ao transporte advectivo na camada limite de concentração que aqui é representada pelo decaimento do fluxo turbulento em ambas as superfícies. A medida que se aproxima da superfície livre, por exemplo em  $y^+ = 140$  o fluxo turbulento decai rapidamente. O número de Reynolds tem grande influência neste decaimento do fluxo na proximidade da superfície livre como será mostrado na Seção 5.4.

A Figura 5.10 ilustra o perfil de RMS da flutuação da concentração dado pela equação normalizada  $rms C'^+ = rms C' / C^+$ . É possível notar dois picos ao longo da altura ( $y^+ \approx 15$  e  $y^+ \approx 140$ ) sendo este de  $y^+ = 140$  o mais elevado dada as condições de contorno estabelecidas no fundo (não deslizamento) e topo (deslizamento livre). Essa mesma evolução foi observada no gráfico obtido com dados de DNS de Nagaosa e Handler (2003).

### 5.3 Simulação numérica do caso base

A simulação de validação (Re150Sc1) foi usada como caso base. Nesta seção são discutidos os principais resultados e detalhes da transferência de massa obtidos para o caso base que não foram explorados na seção de validação. Usando-se conceitos de divergente de superfície e critério  $Q$ , conforme descrito por Nagaosa (1999) pretende-se relacionar as distribuições do campo de velocidade e do campo concentração e suas respectivas flutuações com a transporte da grandeza escalar.

#### 5.3.1 Descrição e análise das estruturas turbulentas do escoamento

A Figura 5.11 mostra a distribuição da componente vertical da vorticidade ( $\omega_y$ ) em um plano localizado imediatamente abaixo da superfície livre. Os planos foram exibidos em quatro instantes referentes à simulação Re150Sc1. Na Figura 5.11 é possível identificar estruturas de vórtices coerentes espalhados no plano  $xz$  conforme proposto por Nagaosa (1999). Uma observação mais detalhada leva à visualização de estruturas rotacionais com  $\omega_y > 0$  sempre

posicionados próximos às estruturas rotacionais com  $\omega_y < 0$ . A vorticidade  $\omega_y$  dada por  $\omega_y = \partial u / \partial z - \partial w / \partial x$  onde  $\partial u / \partial z$ . Valores negativos de vorticidade ( $\omega_y < 0$ ) representam regiões em que a velocidade normal aumenta em relação a direção longitudinal do escoamento, muito mais do que a velocidade transversal em relação a direção longitudinal, ou seja, rotação no sentido horário. Em contrapartida, valores positivos de vorticidade ( $\omega_y > 0$ ) representam regiões em que a velocidade normal diminui em relação a direção longitudinal do escoamento, muito mais do que a velocidade transversal em relação a direção longitudinal, ou seja, rotação no sentido anti-horário.

Na Figura 5.11, as zonas demarcadas pelas letras A, B e C identificam pares de vórtices (com vorticidade vertical negativa e positiva) em cada um dos tempos adimensionais, ilustrando a nova posição de cada um desses pares no domínio de cálculo a medida em que o tempo avança. Os pares de vórtices se deformam ao longo do tempo. A estrutura destacada pela região A se alonga na direção longitudinal enquanto a estrutura destacada pela letra C basicamente mantém a mesma forma para os quatro instantes mostrados.

A evolução das estruturas também reflete a periodicidade do escoamento. A estrutura A no instante sai do domínio reaparecendo no instante (d). Outra análise mostra que a maior parte dos vórtices desloca-se preferencialmente na direção principal do escoamento, sendo essas estruturas importantes no entendimento do transporte da grandeza escalar próxima a superfície livre.

A Figura 5.12 exibe a distribuição da componente  $u'v'$  do tensor de Reynolds em um plano transversal  $yz$  dada por  $-u'v'/u_*^2$  referente a simulação Re150Sc1 onde  $u'v'$  é o tensor de Reynolds e  $u'$  e  $v'$  representam as respectivas flutuações instantâneas da componente da velocidade na direção longitudinal ( $u$ ) e da componente da velocidade na direção normal ( $v$ ) e  $u_*$  a velocidade de fricção. Na escala de cores, os extremos azul e vermelho, correspondem a altos valores positivos e altos valores negativos do tensor de Reynolds. Zonas específicas do domínio são demarcadas pelas letras A e B. Nas zonas A e B é possível visualizar altos valores positivos do tensor de Reynolds.

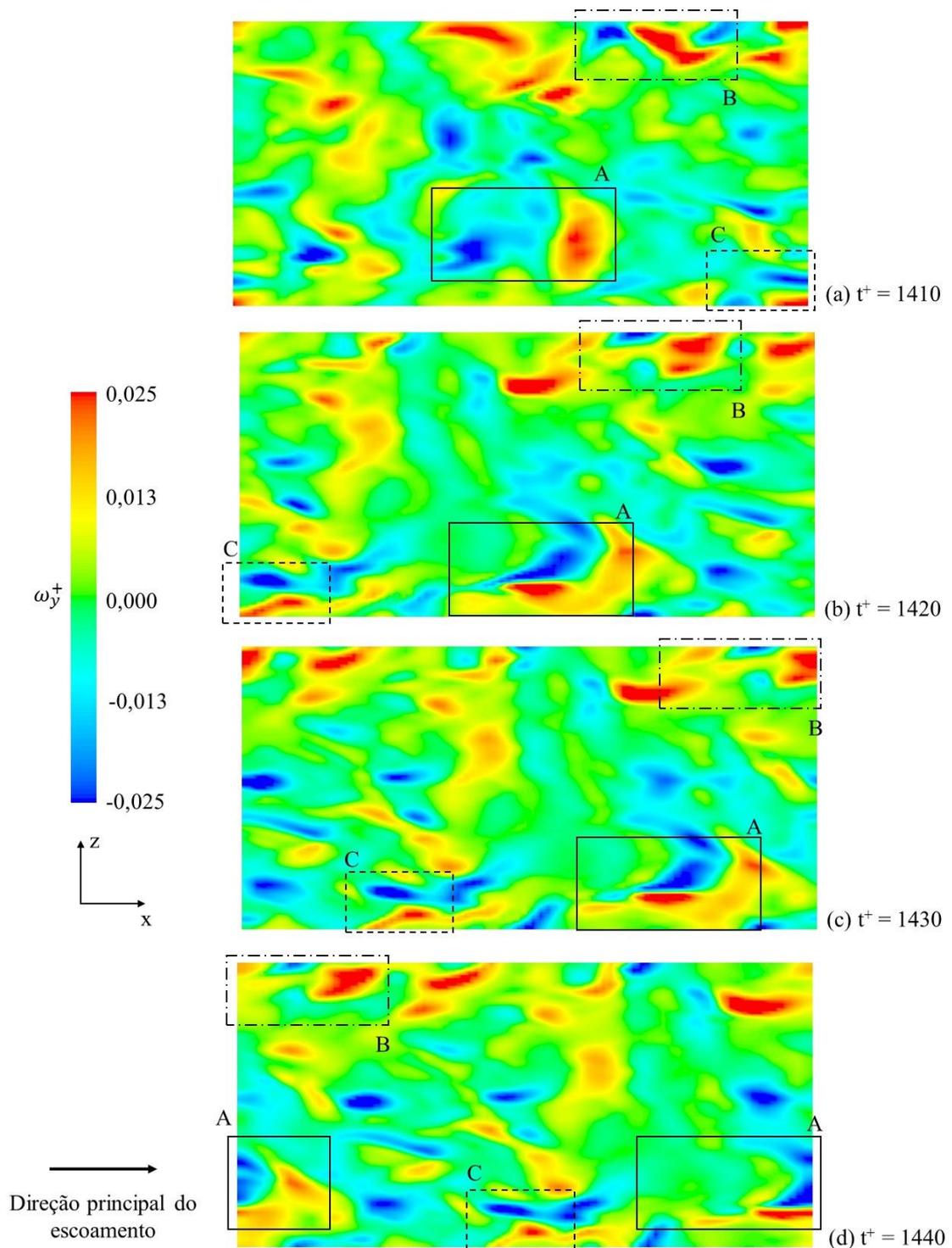


Figura 5.11 – Distribuição do campo da componente vertical de vorticidade instantânea no plano  $xz$  localizado imediatamente abaixo da superfície livre ( $y^+ = 145$ ) em tempos sucessivos. (a)  $t^+ = 1410$ , (b)  $t^+ = 1420$ , (c)  $t^+ = 1430$  e (d)  $t^+ = 1440$

Considerando-se a condição em que  $u'v' < 0$  e que a flutuação  $v'$  é o termo advectivo responsável pelo transporte vertical da quantidade de movimento longitudinal ( $\rho u'$ ) tem-se: no caso de  $\rho u' < 0$ , o transporte vertical ocorrerá principalmente em direção a superfície livre. Em contrapartida, o transporte vertical ocorrerá da superfície livre em direção ao seio do escoamento toda vez que  $\rho u' > 0$ .

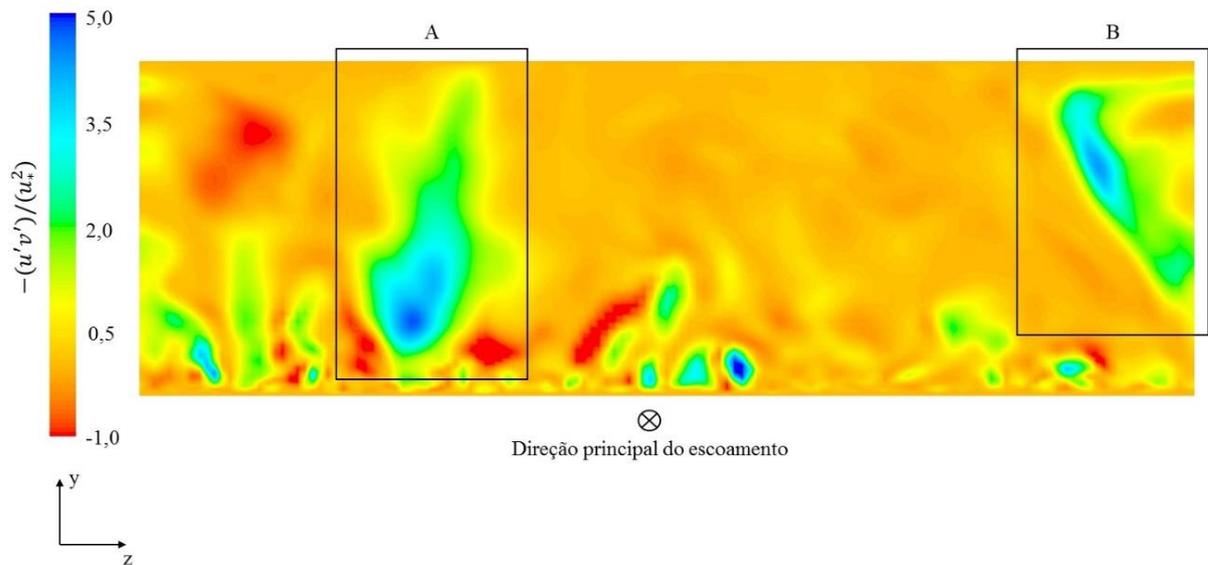


Figura 5.12 – Distribuição do tensor de Reynolds instantâneo em plano transversal  $yz$  em  $x/\delta = 1$  e  $t^+ = 3500$ .

### 5.3.2 Relação entre divergente de superfície e fluxo da grandeza escalar

As imagens exibidas na sequência (Figura 5.13 a Figura 5.15) mostram: (i) a relação existente entre o divergente de superfície e o campo de concentração, (ii) a relação existente entre os vetores velocidade e a flutuação do campo de concentração e (iii) a relação existente entre as estruturas turbulentas visualizadas pelo critério  $Q$  e a flutuação do campo de concentração e vetores velocidades sobrepostos. As imagens da Figura 5.13 (a) e da Figura 5.13 (b) correspondem a visualização instantânea de vetores velocidade e a distribuição do divergente de superfície dado por  $\gamma = (\partial u'/\partial x + \partial w'/\partial z) = -\partial v'/\partial y$  onde  $u', v'$  e  $w'$  são as respectivas flutuações das componentes das velocidades nas direções  $x, y$  e  $z$ . As imagens são

feitas em um mesmo plano  $xz$ , na superfície livre no mesmo instante. A Figura 5.13 (b) exibe o divergente de superfície que pode ser um indicador do fluxo turbulento na interface.

Os círculos destacados na Figura 5.13 (a) e na Figura 5.13 (b) identificam regiões específicas do domínio de estudo. Círculos vermelhos identificados pela letra A correspondem a zonas onde o divergente de superfície é positivo ( $\gamma > 0$ ). Por outro lado, as zonas onde divergentes de superfície são negativos ( $\gamma < 0$ ) correspondem aos círculos azuis identificados pela letra B. É notável que regiões com  $\gamma > 0$  correspondem as regiões onde os vetores velocidade divergem. Esta formação dos vetores velocidade é estabelecida por interações de correntes ascendentes na direção da superfície livre. Por outro lado, vetores velocidade convergentes são encontrados nas regiões onde  $\gamma < 0$ . A formação desses vetores velocidade produz movimentos do fluido da interface na direção do seio do escoamento.

A discussão é complementada pela Figura 5.14 que exibe imagens simultâneas em um plano vertical e transversal ( $yz$ ) ao plano mostrado na Figura 5.13, indicado por uma linha central tracejada. Nesta linha central, são destacadas duas zonas por círculos azuis identificados pela letra B e por círculos vermelhos identificados pela letra A. A Figura 5.14 exibe uma representação instantânea dos vetores velocidade sobrepostos a distribuição do campo flutuação da concentração para a simulação Re150Sc1.

A imagem também apresenta na parte superior um detalhamento de uma região específica do plano de observação. Em termos gerais a figura mostra uma ótima correlação entre a movimentação do fluido (dada pelos vetores velocidade pretos) e a flutuação instantânea de concentração do escalar. Se observarmos uma zona específica no canto inferior esquerdo da figura principal, um vórtice promove uma ligeira acumulação do escalar e sua flutuação apresenta um valor elevado em relação à sua vizinhança.

Na parte superior do domínio (superfície livre) apresentam-se valores de flutuação de concentração negativos nas regiões onde o principal sentido de giro do escoamento tende a retirar a grandeza escalar desta parte do domínio.

Relacionando-se as regiões onde o divergente de superfície é positivo nas imagens da Figura 5.13 e da Figura 5.14 pode ser observado que os vetores velocidade divergem na superfície superior, o que também é notado na zona A destacada na Figura 5.14.

Na zona A, onde o divergente de superfície é positivo, o escoamento superficial diverge e flutuações de velocidade ascendentes trazem concentrações mais baixas do fundo do canal. Por outro lado, em B, o escoamento convergente está ligado a velocidades verticais descendentes, que levam concentrações mais elevadas em direção ao fundo do canal.

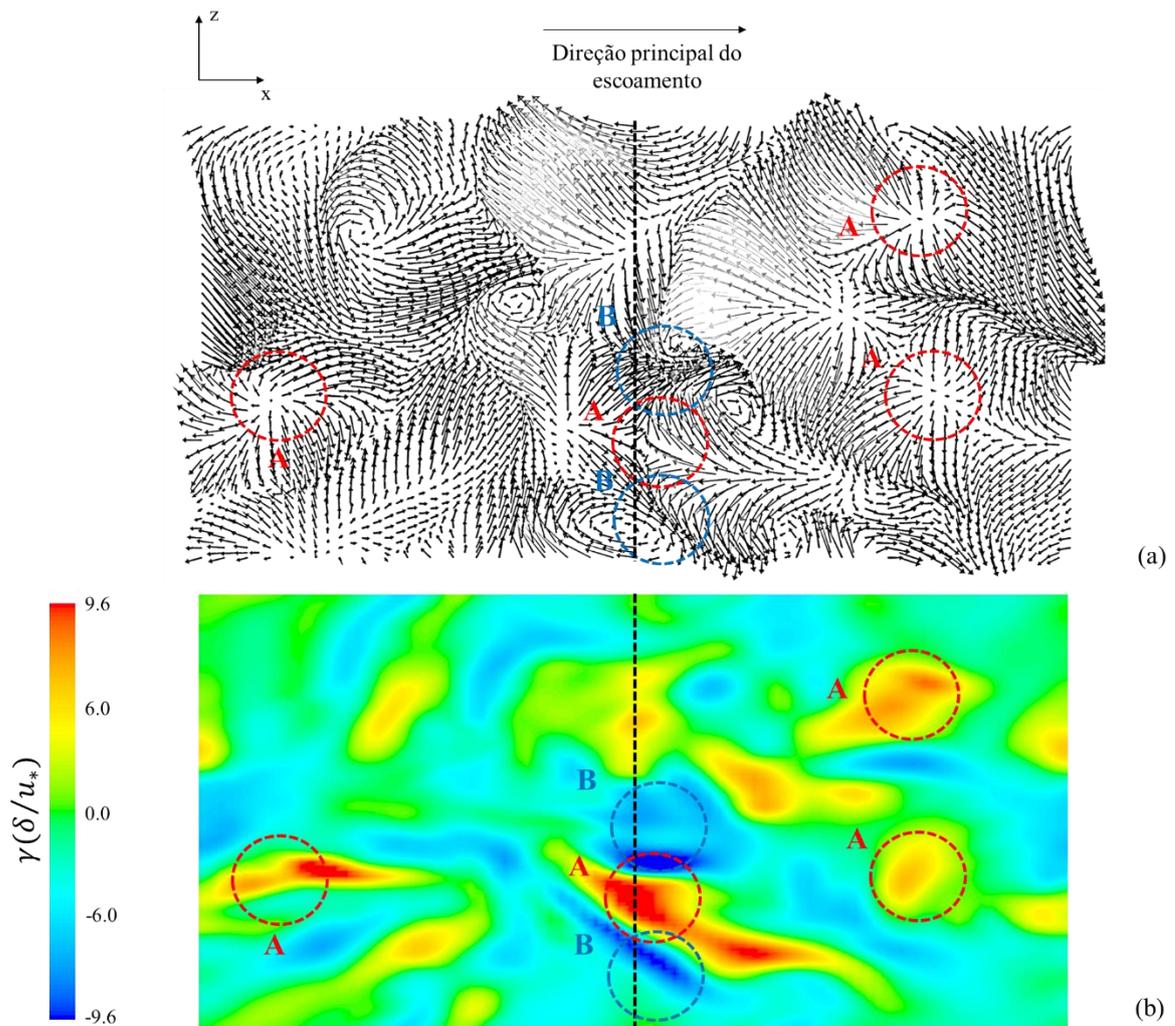


Figura 5.13 – Relação entre (a) os vetores do campo velocidade no plano  $xz$  e (b) o divergente de superfície na interface para número de Reynolds igual a 150 e número de Schmidt igual a 1 em  $t^+ = 7000$ . Círculos vermelhos indicam  $\gamma > 0$  e círculos azuis indicam  $\gamma < 0$ . A linha tracejada indica a posição  $x/\delta = 0,50$ .

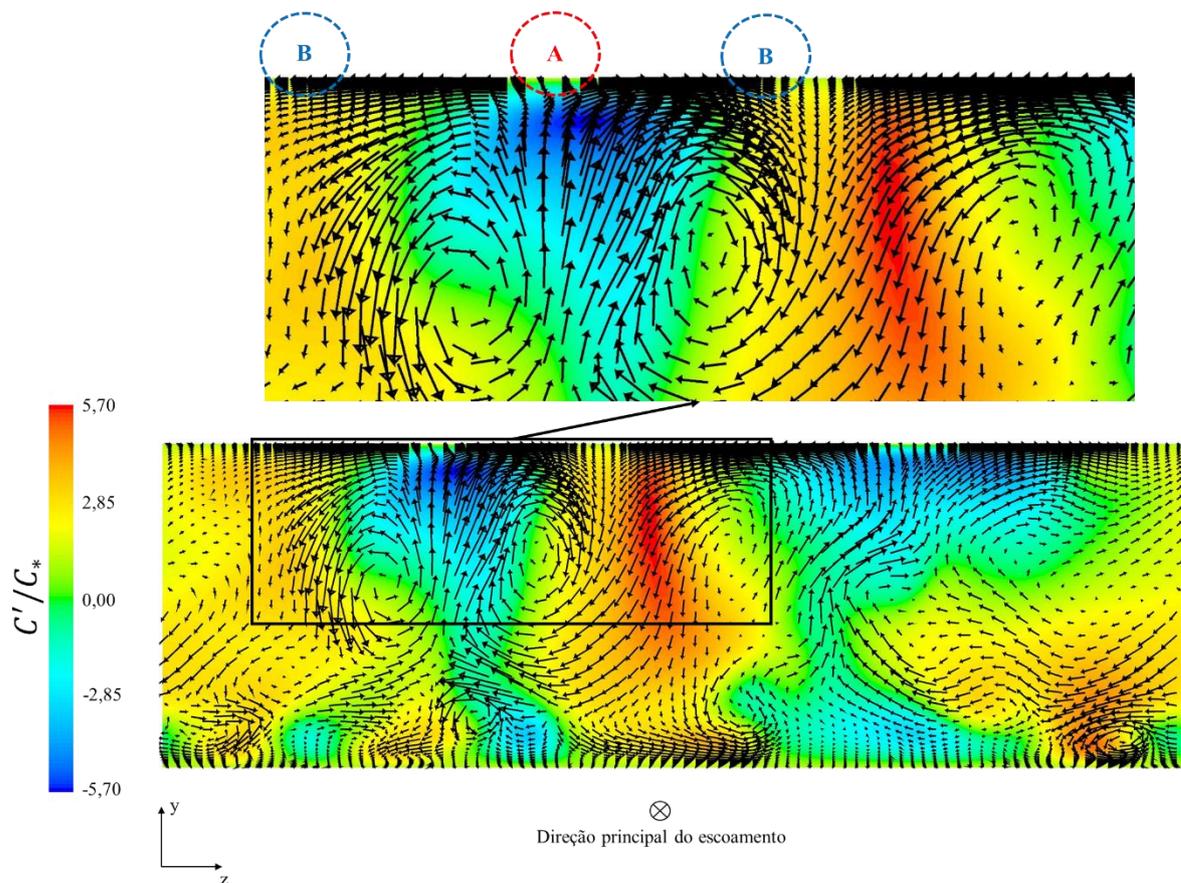


Figura 5.14 – Visualização dos vetores do campo velocidade e da distribuição do campo de flutuação da concentração adimensional em  $t^+ = 3500$  no plano  $yz$  em  $x/\delta = 0,50$ .

Dois vórtices contra-rotativos são claramente visualizados no destaque da Figura 5.14. Em contraste, nos casos em que o divergente de superfície apresenta valores negativos, este transporte acontece na direção contrária, ou seja, da superfície livre em direção ao seio do escoamento.

Essa observação pode ser vista nas zonas B destacadas na Figura 5.14. Esses vórtices têm sentido de giro que promove o direcionamento do fluido em direção a parte inferior do domínio. Na Figura 5.14, a região de intensa cor vermelha indica valores elevados e positivos de flutuação de concentração adimensional, ou seja, o fluido de menor concentração é movimentado do seio do escoamento em direção a superfície livre. A concentração da grandeza escalar sofre uma variação negativa tal como indicado na zona azul ( $C'/C^+ < 0$ ) na região A da Figura 5.14 (divergente positivo).

A Figura 5.15 mostra distribuição de alguns vórtices tridimensionais obtidos pelo critério  $Q$ . O critério  $Q$  é um escalar definido pela Eq. 5.8

$$Q = -\frac{1}{2}(S_{ij}S_{ij} - \Omega_{ij}\Omega_{ij}) \quad \text{Eq. 5.8}$$

onde  $S_{ij}$  e  $\Omega_{ij}$  representam, respectivamente, pelas equações Eq. 5.8 e Eq. 5.10

$$S_{ij} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad i = 1,2,3 \quad \text{Eq. 5.9}$$

$$\Omega_{ij} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad i = 1,2,3 \quad \text{Eq. 5.10}$$

A Figura 5.15 mostra os vórtices obtidos através de isosuperfícies de critério  $Q$  no domínio. Os vórtices construídos representam uma faixa adequada de valores de critério  $Q$  que permite a visualização de vórtices ou estruturas rotacionais. Existem regiões onde a rotação é predominante em relação a deformação ( $Q > 0$ ) e regiões onde a deformação predomina a rotação ( $Q < 0$ ). A fim de identificar os vórtices, 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. Os vórtices identificados da Figura 5.15 são classificados pela componente longitudinal da vorticidade ( $\omega_x$ ). Valores positivos de vorticidade ( $\omega_x > 0$ ) são coloridos na cor vermelha e valores ( $\omega_x < 0$ ) são coloridos em azul. Vários vórtices localizados nesse domínio podem ser observados.

Os valores do critério  $Q$  da figura são coloridos pela vorticidade em  $x$  ( $\omega_x$ ). Estes vórtices são associados a distribuição da flutuação do escalar. Pode-se observar que muitos vórtices têm estrutura alongada próximo a região do topo do domínio (superfície livre). Tais vórtices são responsáveis pela manutenção da rotação tridimensional do escoamento e consequente alta movimentação e transporte do escalar.

A Figura 5.15 também exhibe um plano transversal ( $yz$ ) ao domínio de cálculo e idêntico ao plano apresentado na Figura 5.14. Nesse plano estão exibidos os valores de flutuação do escalar



preferencialmente os vórtices das regiões destacadas, ou seja, o valor numérico da iso superfície foi escolhido com este fim. A diferença de coloração observada no detalhe (a) da Figura 5.15 comprova que esses vórtices são contra rotativos mas desta vez devidos aos valores de vorticidade e não pela visualização dos vetores. Esses vórtices são estruturas alongadas e quase longitudinais. O vórtice vermelho destacado da Figura 5.15 (a) tem origem de movimentação na parede inferior como pode ser observado no plano geral do domínio.

Nos detalhes das Figura 5.15 (a) ainda é possível observar que o vórtice identificado pelo  $Q$ -critério na cor vermelha, portanto com vorticidade positiva ( $\omega_x > 0$ ) e o vórtice com vorticidade negativa ( $\omega_x < 0$ ) identificados pelo critério  $Q$  na cor azul, atravessam uma região demarcada no plano  $yz$  da Figura 5.14 pelo divergente de superfície positivo. Ou seja, a região interior aos dois vórtices contra rotativos promove o direcionamento do escoamento na vertical do seio do escoamento em direção a superfície livre. Convém lembrar, que no início desta seção, pares de estruturas rotacionais (negativo e positivo) similares aos pares das estruturas mostradas nesta figura também foram exibidos, só que em outro plano (horizontal).

### 5.3.3 Relação entre as estruturas turbulentas do escoamento e o transporte da grandeza escalar

A sequência de imagens da Figura 5.16 (a) a Figura 5.16 (c) mostra a distribuição de flutuações instantâneas do campo escalar e do campo de velocidade longitudinal e transversal feitas em um plano horizontal ( $xz$ ). Esse plano está localizado imediatamente abaixo da superfície livre. Os dados referem-se à simulação  $Re150Sc1$  e ao tempo adimensional  $t^+ = 3500$ . De maneira similar ao observado na Figura 5.12 onde foi possível notar uma forte tendência da movimentação do escoamento em direção a superfície livre e a partir desse movimento, a distribuição do escalar foi modificada. A correlação entre as flutuações  $u'$  e  $v'$  (componente do tensor de tensões de Reynolds) leva a movimentação da grandeza escalar em direção a superfície. A ideia aqui é mostrar, em um plano horizontal ( $xz$ ), o que acontece se for observado simultaneamente a flutuação do campo escalar, da componente longitudinal da velocidade e da componente da velocidade vertical. Esse comportamento indica uma aparente proporcionalidade entre  $\langle u'v' \rangle$  e  $\langle v'C' \rangle$ .

A associação entre as três imagens é muito interessante do ponto de vista de análise da correlação existente entre a movimentação do escoamento (seja ela longitudinal ou vertical) e o transporte da grandeza escalar. As zonas em azul da Figura 5.16 (a) são uma representação da redução local ( $C'^+ < 0$ ) da concentração do escalar. Isso ocorre devido a movimentação ascendente do fluido com baixa concentração proveniente da região inferior do domínio onde a condição de contorno é assumida nula. Assim, se observarmos a mesma localização espacial na Figura 5.16 (b) e Figura 5.16 (c) nota-se flutuações altas e positivas para a velocidade vertical (indicando escoamento ascendente) e alta e negativa para velocidade longitudinal (indicando escoamento contrário ao escoamento principal). Uma associação análoga é também notada se observarmos regiões de ( $C'^+ < 0$ ) onde esperamos haver uma movimentação do fluido da parte superior na direção do seio do escoamento ( $v' < 0$ ). Ao longo de todo o plano essas associações podem ser feitas várias vezes para um mesmo instante. É conveniente lembrar que as três distribuições mostradas ocorrem no mesmo instante de tempo adimensional.

A Figura 5.17 mostra a visualização tridimensional do domínio computacional com a representação da distribuição do escalar, em planos transversais à direção principal do escoamento. As imagens da Figura 5.17 (a), Figura 5.17 (b) e Figura 5.17 (c) mostram três dessas visualizações do campo concentração em instantes de tempo adimensional próximos (com intervalos  $\Delta$  de  $t^+ = 10$ ) logo após a inserção da grandeza escalar no escoamento.

A Figura 5.17 (d) representa um instante de tempo bastante avançado, muito após a inserção da grandeza escalar no escoamento. O principal objetivo da Figura 5.17 é explicar a contribuição dos vórtices longitudinais no transporte da grandeza escalar. Os planos transversais localizados em  $x/\delta = 1,57$ ,  $x/\delta = 3,14$  e  $x/\delta = 4,71$  foram escolhidos para promover a visualização do transporte de certas estruturas do escoamento em cada instante de tempo mostrado. Por exemplo, as estruturas observadas na parte superior do domínio no plano  $x/\delta = 1,57$  da Figura 5.17(a) podem ser visualizadas na Figura 5.17 (b) no plano  $x/\delta = 3,14$  e na Figura 5.17 (c) no plano  $x/\delta = 4,71$ .

Os vórtices longitudinais (mostrados anteriormente na Figura 5.15) são responsáveis pela formação das estruturas do tipo “pluma” observadas na parte superior das figuras. Essas estruturas representam a movimentação vertical da grandeza escalar na direção do seio do escoamento devido a existência de dois vórtices contra rotativos com giro em direção opostas. É conveniente reforçar o fato de que, há um aumento da grandeza escalar na direção do seio do

escoamento devido às estruturas tipo “pluma” e à condição de contorno da concentração na parte superior ser o máximo encontrado no domínio. A Figura 5.17 (d) mostra o escoamento e o transporte da grandeza escalar bem desenvolvido com variações e movimentações verticais do escalar bastante acentuadas.

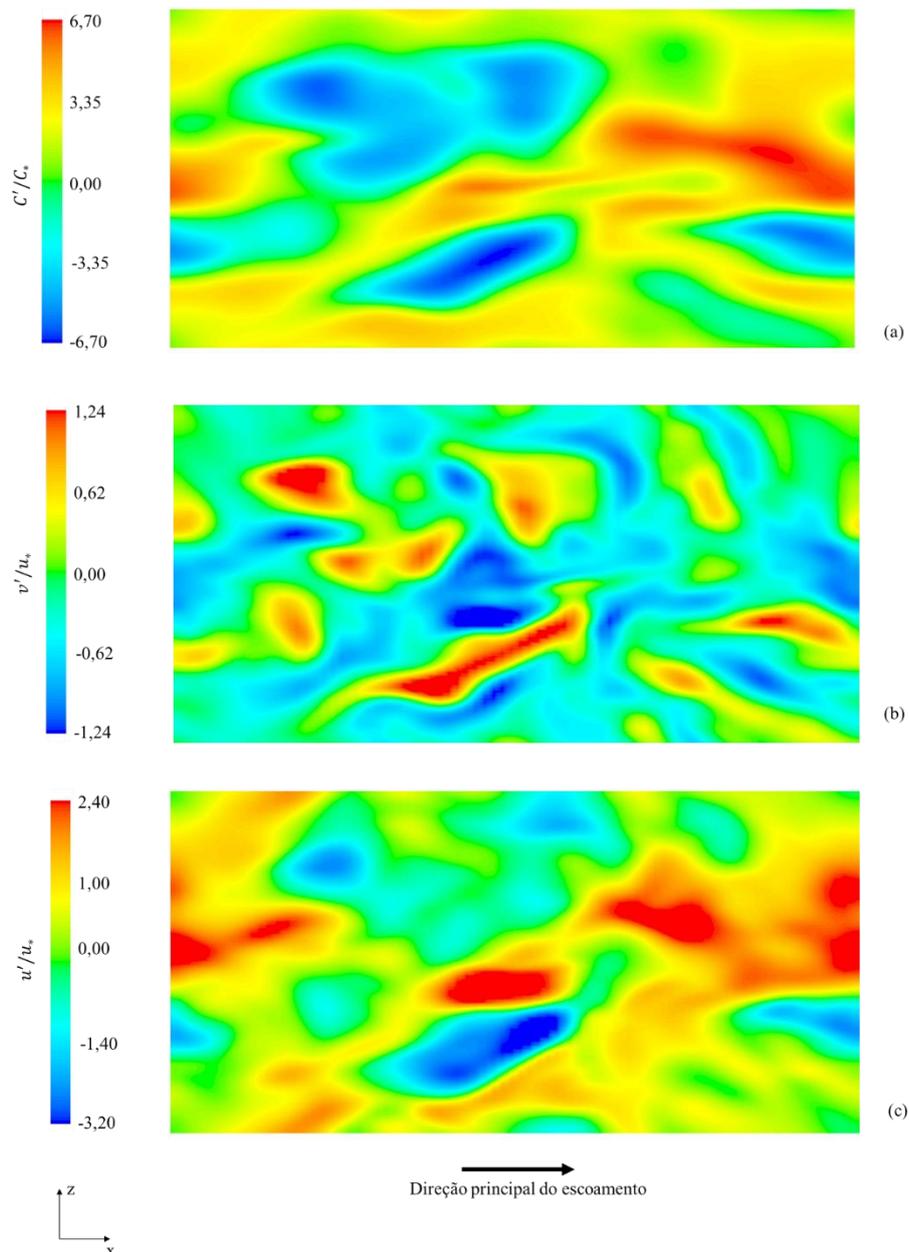


Figura 5.16 – Campo de flutuações no plano  $xz$  no instante de tempo  $t^+ = 3500$  (a) concentração, (b) componente normal da velocidade e (c) componente longitudinal da velocidade

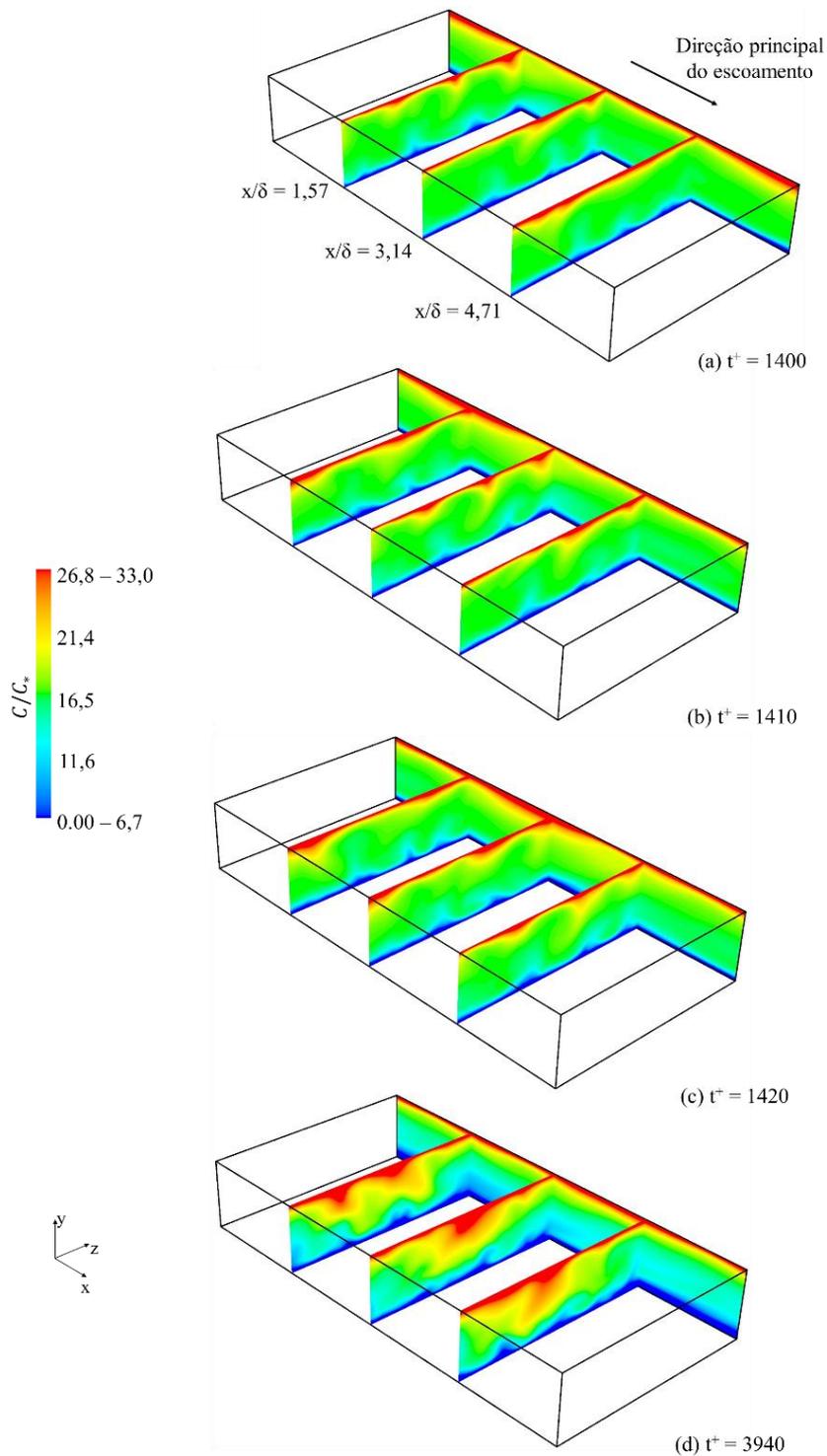


Figura 5.17 – Visualização da distribuição do campo concentração instantânea em planos transversais localizados a  $x/\delta = 1,57$ ,  $x/\delta = 3,14$  e  $x/\delta = 4,71$  (a)  $t^+ = 1400$ , (b)  $t^+ = 1410$ , (c)  $t^+ = 1420$  (d)  $t^+ = 3940$

## 5.4 Análise da influência dos parâmetros governantes

No presente estudo, foram testados diferentes casos para análise do fenômeno de transferência de massa de compostos em superfície líquida quiescente. Três números de Schmidt (1, 200 e 580) e três números de Reynolds baseado na velocidade de fricção (150, 640 e 1280) foram investigados.

Como dito anteriormente, o objetivo principal deste estudo é calcular a transferência de um passivo escalar em escoamento turbulento e analisar a influência destes parâmetros na transferência de massa do composto.

A metodologia LES e o modelo de submalha dinâmico usado foram capazes de prever corretamente variações do coeficiente de transferência de massa. A malha usada na vizinhança da superfície livre foi suficientemente refinada para capturar as pequenas escalas verticais do campo escalar, assemelhando-se a resolução de malha utilizada em estudos de DNS, tais como definidos por Jiang e Lai (2009).

Esta melhor resolução permitiu o cálculo da grandeza escalar, possibilitando a captura pelo modelo da contribuição de escalas não resolvidas. Os principais parâmetros utilizados nas normalizações do presente trabalho estão mostrados na Tabela 5.2.

Tabela 5.2 – Principais parâmetros utilizados nas normalizações

$Re$	$Sc$	$u_*$	$q$	$C_*$	$t^*$
150	1	0,0025	7,50E-05	3,00E-02	0,160
	200	0,0025	2,40E-06	9,60E-04	0,160
	580	0,0025	1,50E-06	6,00E-04	0,160
640	1	0,011	2,30E-04	2,09E-02	0,008
	200	0,011	1,34E-05	1,22E-03	0,008
	580	0,011	9,60E-06	8,73E-04	0,008
1280	1	0,021	3,30E-04	1,57E-02	0,002
	200	0,021	1,53E-05	7,29E-04	0,002
	580	0,021	5,30E-06	2,52E-04	0,002

## 5.4.1 Influência do número de Reynolds no escoamento e no transporte escalar

### 5.4.1.1 Descrição e análise das estruturas turbulentas do escoamento

Os gráficos da Figura 5.18 mostram a identificação dos vórtices pelo critério  $Q$  calculado conforme Eq. 5.8. A Figura 5.18 (a) é referente ao escoamento com número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.18 (b) ilustra o critério  $Q$  referente ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280. Os vórtices da figura foram obtidos através da construção de isosuperfícies de  $Q$ . Analogamente aos resultados apresentados na Figura 5.15, esses vórtices representam uma faixa de valores de  $Q$  onde a rotação é predominante em relação a deformação. Os vórtices identificados pelo critério  $Q$  da figura foram coloridos pela vorticidade em  $x$  ( $\omega_x$ ). Vorticidades negativas ( $\omega_x < 0$ ) são coloridas na cor azul e vorticidades positivas ( $\omega_x > 0$ ) são coloridas na cor vermelha. Vários vórtices localizados no domínio de cálculo podem ser observados. A estrutura alongada é frequente em muitos vórtices.

Nesta análise comparativa da identificação de vórtices entre dois números de Reynolds (640 e 1280) as isosuperfícies foram construídas com o mesmo valor numérico de  $Q$ , ou seja, a mesma identificação dos vórtices foi utilizada para a comparação. Assim, pode-se notar que para o mesmo valor de  $Q$  a quantidade de vórtices identificados no escoamento com número de Reynolds igual a 1280 é bem maior. A escolha do valor de  $Q$  permitiu somente a visualização dos vórtices próximo ao contorno inferior domínio nos dois casos. A utilização de outro valor de  $Q$  tornaria impossível o destacamento de vórtices no domínio interior mesmo visualizando próximo a superfície livre.

O mesmo problema pode ocorrer no caso de utilizar o valor de  $Q$  igual ao usado nesta figura no escoamento de número de Reynolds igual a 150. Seria impossível a visualização de vórtices. Com o aumento do número de Reynolds, os movimentos rotacionais dos vórtices são muito mais intensos em relação à deformação do escoamento. Outra observação refere-se a forma desses vórtices identificados. Esses possuem uma configuração menos alongadas que os observados no escoamento com número de Reynolds igual a 150. As estruturas são mais curtas, porém muito mais numerosas.

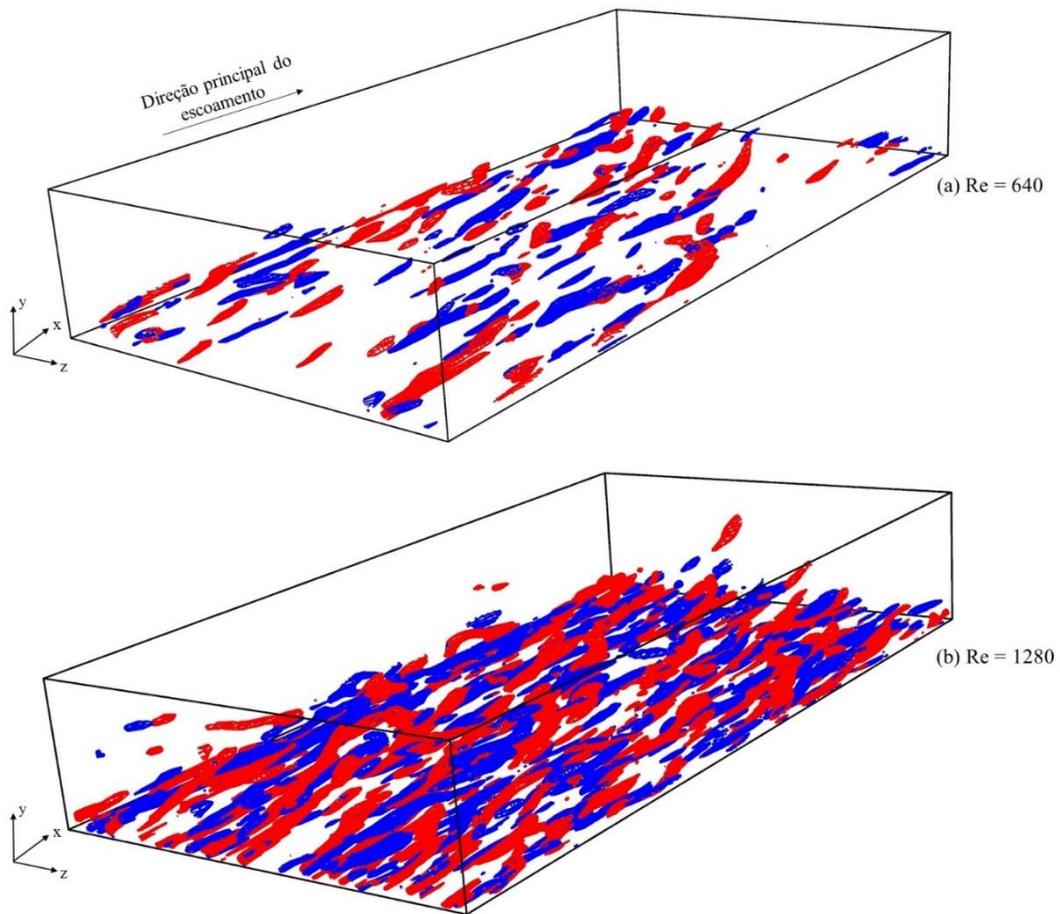


Figura 5.18 - Turbulência visualizada pelo critério  $Q$  no instante  $t^+ = 7000$  em  $y/\delta = 1$  para (a)  $Re = 640$  e (b)  $Re = 1280$

As Figura 5.19 e Figura 5.20 exibem a distribuição dos vetores da flutuação instantânea do campo velocidade no plano  $xz$  em  $y/\delta = 1$ , o divergente de superfície ( $\gamma$ ) normalizado pela velocidade de fricção ( $u_*$ ) e exibido no mesmo plano  $xz$  e instante  $t^+ = 7000$ . Em ambas as figuras, valores positivos do divergente de superfície ( $\gamma > 0$ ) são coloridos em vermelho e valores negativos do divergente de superfície ( $\gamma < 0$ ) são coloridos em azul. Conforme já descrito, valores positivos do divergente de superfície são observados em regiões do domínio onde os vetores velocidade e as correntes do fluido ocorrem no sentido ascendente, ou seja, do seio do escoamento em direção a superfície livre. Em contrapartida, valores negativos do divergente de superfície relacionam-se a movimentos da superfície livre em direção ao seio do escoamento.

As imagens da Figura 5.19 e Figura 5.20 permitem ainda algumas conclusões relativas ao divergente de superfície de ambos os escoamentos. Nessa figura, em comparação ao mostrado nas simulações do caso base (número de Reynolds igual a 150) pode-se notar uma distribuição do divergente de superfície com uma intensa quantidade de máximos ( $\gamma > 0$ ) e mínimos ( $\gamma < 0$ ).

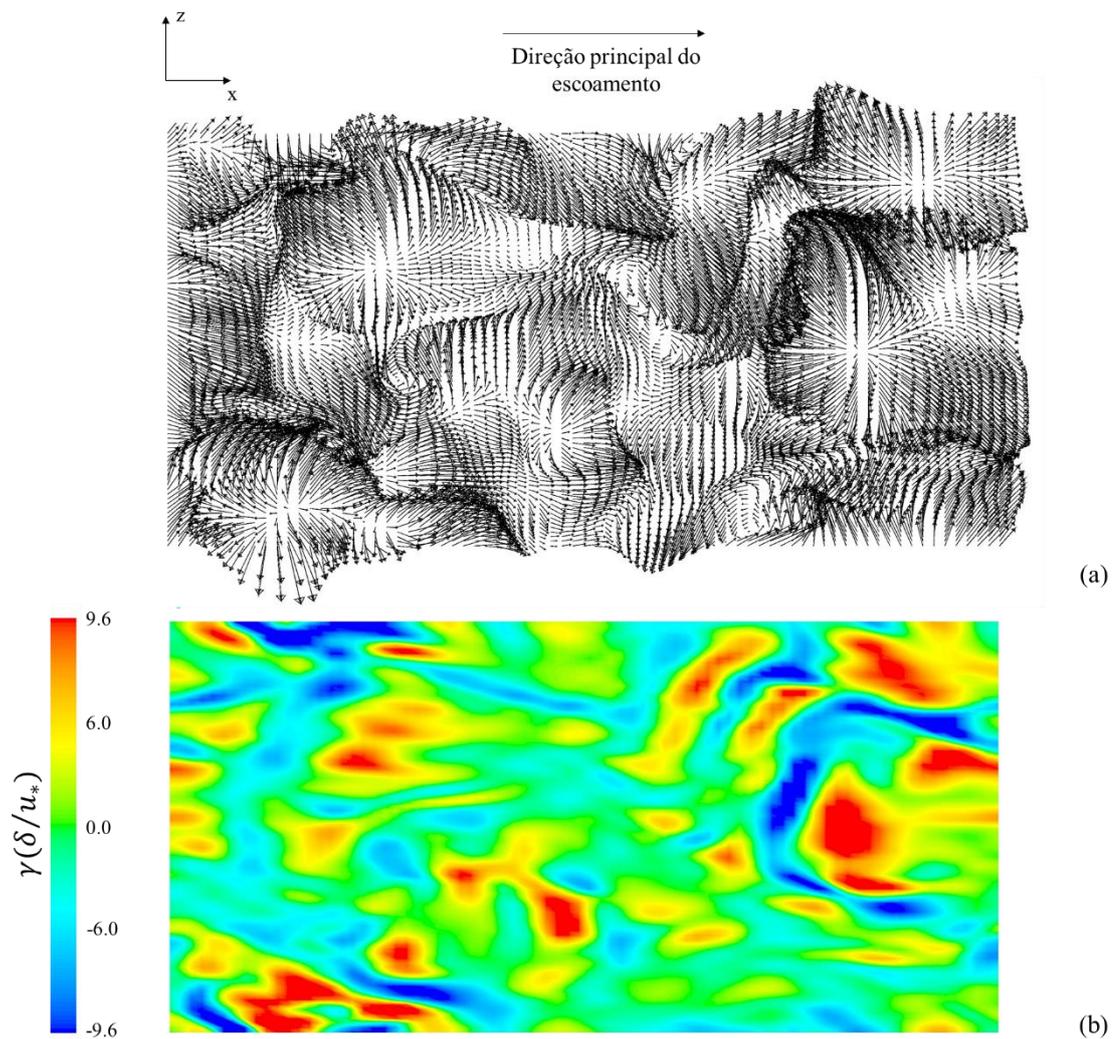


Figura 5.19 – Relação entre os vetores construídos a partir da flutuação instantânea das componentes das velocidade no plano  $xz$  e o divergente de superfície na interface para  $Re=640$  e  $Sc=1$  em  $t^+ = 7000$  (a) vetores do campo velocidade e (b) distribuição do divergente de superfície

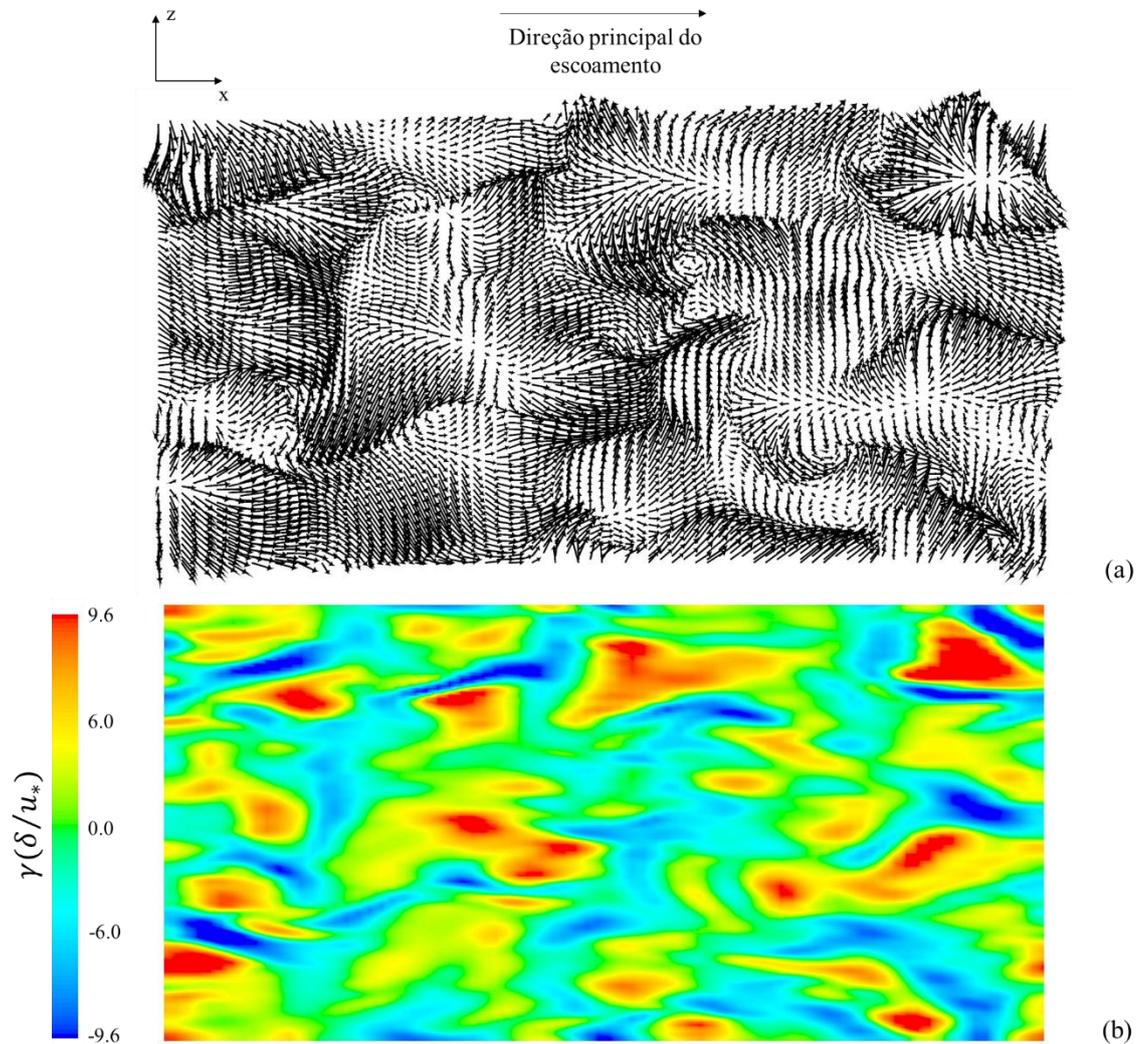


Figura 5.20 – Relação entre os vetores construídos a partir da flutuação instantânea das componentes das velocidade no plano  $xz$  e o divergente de superfície na interface para  $Re=1280$  e  $Sc=1$  em  $t^+ = 7000$  (a) vetores do campo velocidade e (b) distribuição do divergente de superfície

A quantidade de correntes ascendentes e descendentes de escoamento é maior para números de Reynolds maiores, causando maior mistura do escalar em uma área maior do domínio aumentando a região do seio do escoamento e reduzindo a espessura da camada limite da concentração.

### 5.4.1.2 Estatísticas da turbulência

Nesta seção são exibidos perfis verticais das estatísticas de turbulência do escoamento e transporte de escalar construídos no centro do domínio. Dessa forma, as curvas da Figura 5.21 (a) a Figura 5.21 (l) representam a evolução estatística (i) da média da velocidade longitudinal (ii) RMS da flutuação da velocidade, (iii) componente do tensor das tensões de Reynolds e (iv) RMS da flutuação da vorticidade para os números de Reynolds investigados no presente trabalho.

As curvas da Figura 5.21 (a) a Figura 5.21 (c) apresentam dados da velocidade média na direção longitudinal do escoamento no perfil vertical localizado no centro do domínio normalizados pela velocidade de fricção ( $u_*$ ) para diferentes números de Reynolds. A Figura 5.21(a) refere-se ao número de Reynolds igual a 150, a Figura 5.21 (b) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.21 (c) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280. É interessante observar que para todos os números de Reynolds, o perfil vertical segue a teoria de camada limite turbulenta em canal aberto, que indica as três zonas principais: zona linear  $y^+ < 5$ , onde os efeitos viscosos são maiores que os efeitos da turbulência. Entre  $y^+ = 5$  e  $y^+ = 30$  pode-se observar uma zona de transição entre os perfis linear e logarítmico e a partir de  $y^+ \approx 30$  o perfil assume a forma logarítmica. A região onde ocorre alteração com a mudança do número de Reynolds do escoamento é a região logarítmica que se estenderá além do valor máximo mostrado na Figura 5.1 que refere-se a simulação de validação.

As curvas da Figura 5.21 (d) a Figura 5.21 (f) mostram os perfis de RMS da velocidade onde  $rms u'^+ = rms u' / u_*$ ,  $rms v'^+ = rms v' / u_*$  e  $rms w'^+ = rms w' / u_*$ . A Figura 5.21 (d) refere-se ao número de Reynolds igual a 150, a Figura 5.21 (e) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.21 (f) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280. No presente estudo próximo na parte inferior do domínio, as magnitudes de RMS da flutuação da velocidade tem valores muito próximos. O pico de intensidade de flutuação da velocidade ocorre na mesma posição adimensional para todos os números de Reynolds em  $y^+ = 20$ . O valor da produção de turbulência longitudinal tem a mesma tendência para os três números de Reynolds estudados. O mesmo ocorre para as produções vertical e transversal de turbulência. Na superfície livre o valor de RMS tem valor máximo local na faixa de 0,85 a 1 para ambos os números de Reynolds, ou seja, a posição do pico é mantida no caso de valores adimensionais.

As curvas da Figura 5.21 (g) a Figura 5.21 (i) apresentam dados da componente  $\langle u'v' \rangle$  do tensor das tensões de Reynolds para diferentes números de Reynolds. A Figura 5.21 (g) refere-se ao número de Reynolds igual a 150, a Figura 5.21 (h) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.21 (i) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280. O perfil obtido para os três números de Reynolds estudados é similar com valor máximo na região próxima à parede do fundo, existindo um leve aumento no valor do pico.

As Figura 5.21 (j) a Figura 5.21 (l) exibem os perfis de RMS da flutuação de vorticidade para diferentes números de Reynolds. A Figura 5.21 (j) refere-se ao número de Reynolds igual a 150, a Figura 5.21 (k) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.21 (l) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280. O perfil obtido para os três números de Reynolds estudados é similar com valor máximo na região próxima à parede do fundo. As curvas mostram que a maior produção de vórtices ocorre próxima à parede inferior com vorticidade máxima na direção transversal, a produção vertical de momentum longitudinal também em  $y^+ \approx 20$  em todos os números de Reynolds investigados.

É importante notar que, devido à normalização com  $u_*$ , se a variável se mantém constante com o aumento do número de Reynolds, significa que essa variável é diretamente proporcional a  $u_*$ . Por outro lado se essa variável decresce lentamente com o número de Reynolds, isto pode indicar que o valor dimensional (não normalizado) aumentou, porém não proporcionalmente a  $u_*$ .

As curvas da Figura 5.22 (a) a Figura 5.22 (i) representam os perfis de concentração média, RMS da flutuação da concentração e fluxo escalar turbulento para diferentes números de Reynolds. As curvas da Figura 5.22 (a) a Figura 5.22 (c) apresentam dados médios de concentração no perfil vertical localizado no centro do domínio. A Figura 5.22 (a) refere-se ao número de Reynolds igual a 150, Figura 5.22 (b) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.22 (c) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280. As curvas apresentadas da Figura 5.22 (d) a Figura 5.22 (f) mostram os perfis de RMS da flutuação da concentração dado por  $rms C'^+ = rms C' / C_*$ . A Figura 5.22 (d) refere-se ao número de Reynolds igual a 150, Figura 5.22 (e) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.22 (f) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280.

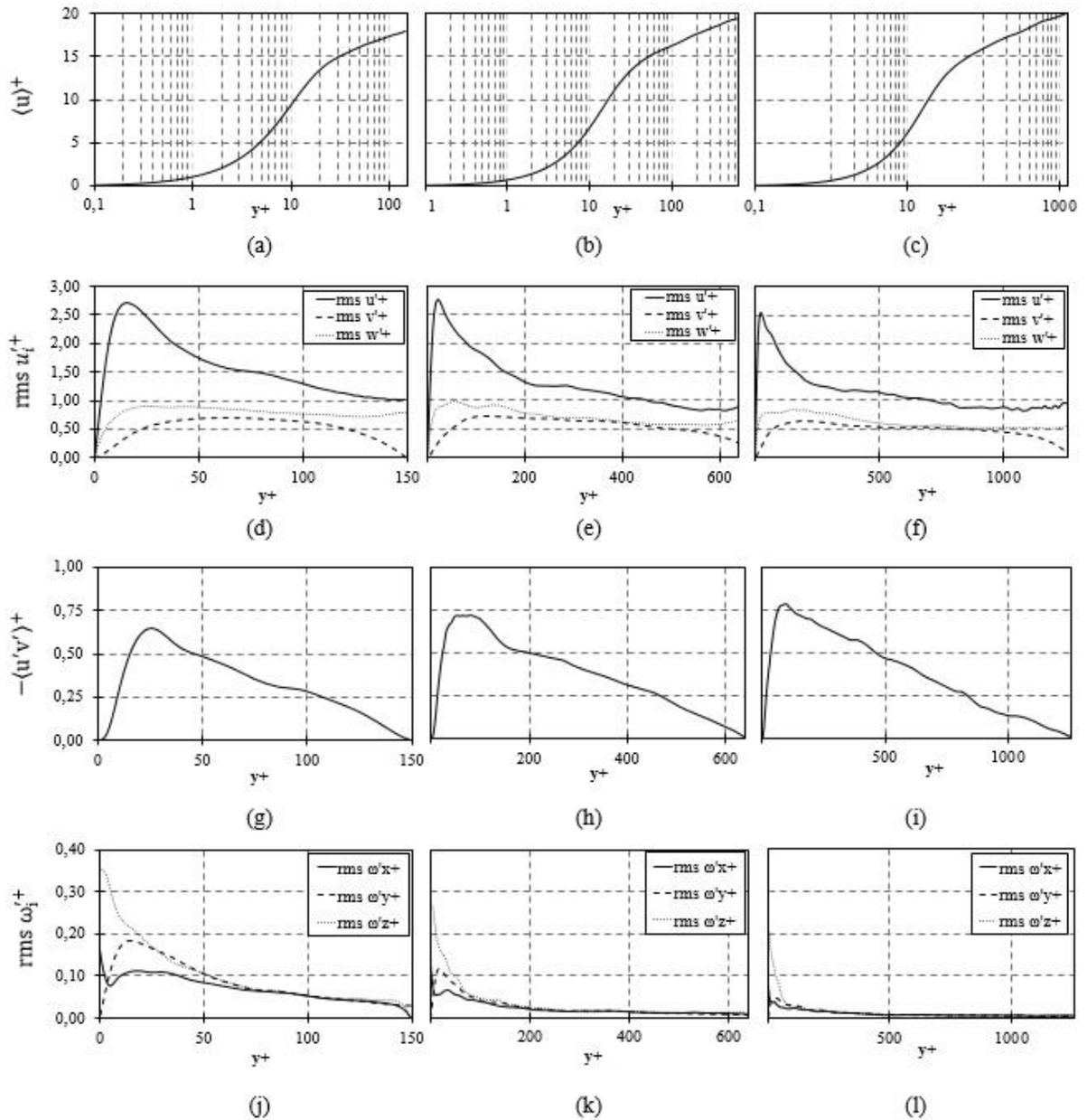


Figura 5.21 – Velocidade média longitudinal para: (a)  $Re=150$ , (b)  $Re=640$  e (c)  $Re=1280$ ; RMS da flutuação de velocidade para: (d)  $Re=150$ , (e)  $Re=640$  e (f)  $Re=1280$ ; Tensor de Reynolds para (g)  $Re=150$ , (h)  $Re=640$  e (i)  $Re=1280$ ; RMS da flutuação de vorticidade para (j)  $Re=150$ , (k)  $Re=640$  e (l)  $Re=1280$

As curvas da Figura 5.22 (g) a Figura 5.22 (i) mostram, por fim, também para diferentes números de Reynolds, os perfis do fluxo turbulento de escalar dado por  $\langle v'C \rangle^+ = \langle v'C' \rangle / (C_* u_*)$ . De forma análoga, a Figura 5.22 (d) refere-se ao número de Reynolds igual a

150, Figura 5.22 (e) ao número de Reynolds igual a 640 e a Figura 5.22 (f) ao escoamento com número de Reynolds igual a 1280.

Ao observar os gráficos mostrados na Figura 5.22 (a) até a Figura 5.22 (c) pode ser visto um aumento do valor máximo de concentração adimensional à medida que o número de Reynolds do escoamento aumenta. Isto ocorre devido à equação de normalização dos valores de concentração da grandeza escalar que considera o cálculo de gradiente de concentração no fundo mas também o valor da velocidade de fricção para cada Reynolds. Recordando que  $C^+ = \langle C \rangle / C_*$  com  $C_* = q / u_*$  e  $q = -\langle v' C' \rangle + D dC / dy$ , tem-se que o valor de  $u_*$  influencia no cálculo da concentração, para os diferentes números de Reynolds. Interessante notar que, a velocidade de fricção varia de uma ordem de grandeza nos casos em que o número de Reynolds aumenta de 150 para 1280. A medida que o valor de  $u_*$  aumenta,  $C_*$  diminui e conseqüentemente provoca o aumento do valor de  $C^+$ . Porém, além dessa observação quanto ao aumento dos valores de concentração adimensional, o aumento do número de Reynolds causa uma modificação na forma da curva, mais visível nesses gráficos próximo à superfície livre (nos casos em que  $y^+$  é máximo): um gradiente de concentração maior é observado para os maiores números de Reynolds.

Os gráficos de RMS da flutuação da concentração da grandeza escalar permitem análises interessantes e a confirmação da teoria quanto à influência do aumento da turbulência na redução da espessura da camada limite de concentração próximo à superfície livre. O valor máximo de RMS ao longo do perfil vertical ocorre, para todos os números de Reynolds testados, numa mesma distância adimensional da superfície livre  $y_{sup.livre}^+ - y_{max.rms}^+ \approx 30$  o que mostra uma consistência da normalização nos valores de RMS de flutuação de concentração. Vale ressaltar que mesmo em distâncias adimensionais iguais os picos de variação local de escalar ocorrem mais próximo da superfície livre quando calculamos os valores dimensionais no domínio de cálculo. Assim, para os valores de Reynolds iguais a 150, 640 e 1280 os picos de RMS da flutuação de concentração estão em  $y/\delta = 0,89, 0,96$  e  $0,98$ , respectivamente. A aproximação do pico de RMS da flutuação de concentração da superfície livre com o aumento do número de Reynolds, está associada ao aumento da turbulência e conseqüente aumento do transporte advectivo da grandeza escalar. Isso promove uma maior mistura do escalar ao longo da altura do domínio e assim uma diminuição da espessura da camada de concentração na proximidade da superfície livre. O pico de RMS está localizado dentro da camada limite de

concentração, região onde estão as maiores variações de flutuação da concentração. Ao longo de quase toda a extensão do domínio na direção vertical o valor de  $rms C'^+$  se mantém aproximadamente constante e igual a 2 para todos os Reynolds. No interior do domínio, denominado de seio do escoamento, encontra-se a região de maior mistura da propriedade escalar.

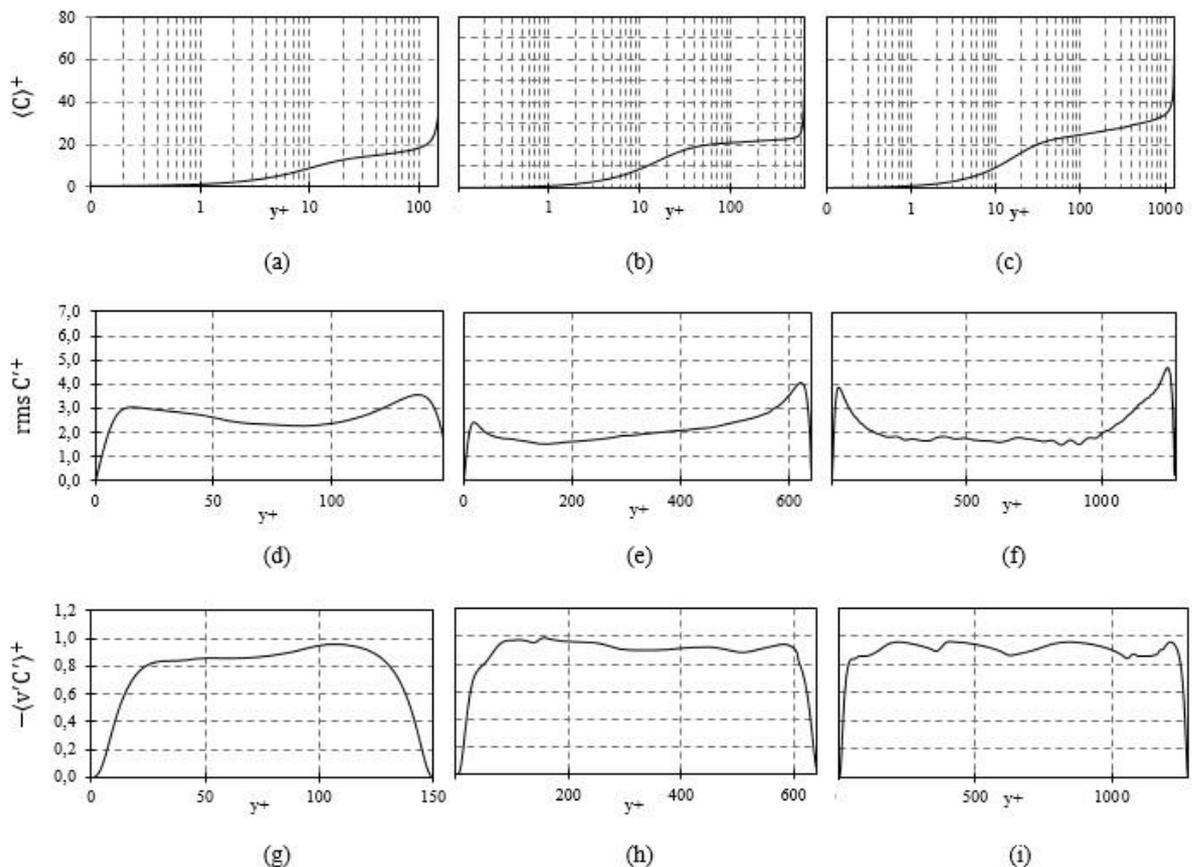


Figura 5.22 – Estatística do transporte de escalar: concentração média para: (a)  $Re=150$ , (b)  $Re=640$  e (c)  $Re=1280$ ; RMS da flutuação de concentração para: (d)  $Re=150$ , (e)  $Re=640$  e (f)  $Re=1280$ ; Fluxo escalar turbulento para: (g)  $Re=150$ , (h)  $Re=640$  e (i)  $Re=1280$ .

A influência do número de Reynolds no fluxo turbulento de escalar está associada a parcela do fluxo turbulento de escalar total que aumenta à medida que o número de Reynolds aumenta. Para entender essa afirmação é necessário recapitular o conceito de fluxo turbulento de escalar total dado por  $q = -\langle v' C' \rangle + D. dC/dy$  que obviamente associa as parcelas referentes ao fluxo turbulento e difusivo. Dado que os valores mostrados do fluxo turbulento de escalar  $\langle v' C' \rangle^+$  são normalizados pelo fluxo turbulento total ( $q$ ), o gráfico indica diretamente ao longo da altura

do canal na direção vertical a contribuição das parcelas advectivas e difusivas no fluxo turbulento total de escalar. Próximo à superfície livre, o transporte do escalar é dominado pelo transporte difusivo, o que é confirmado pelos gráficos da Figura 5.22 (g) até a Figura 5.22 (i) pelo decaimento do valor do fluxo próximo do valor máximo de  $y^+$ . Com o aumento do número de Reynolds, os gráficos tendem a preencher mais a zona de patamar máximo do fluxo turbulento total, indicando um aumento da contribuição do fluxo advectivo em relação ao difusivo.

### 5.4.1.3 Espectro de energia

O espectro mede a distribuição das variâncias de uma variável sobre comprimento de onda ou frequência. Se a variável é um componente de velocidade, o espectro descreve a distribuição da energia cinética sobre o comprimento de onda ou frequência. As curvas apresentadas nas Figura 5.23 (a) a Figura 5.23 (c) correspondem ao perfil do espectro da velocidade na direção longitudinal para diferentes números de Reynolds. A Figura 5.23 (a) corresponde ao número de Reynolds igual a 150, a Figura 5.23 (b) corresponde ao número de Reynolds igual a 640.

O escoamento com número de Reynolds igual a 1280 tem seu espectro de energia turbulenta representado na Figura 5.23 (c). As abscissas em todos os gráficos correspondem a frequência em Hz. As figuras mostram a análise espectral da velocidade longitudinal. Embora muitos outros gráficos de densidade espectral possam ser produzidos, as imagens das figuras foram obtidas a partir dos dados de velocidade em um ponto localizado no centro do domínio em  $y^+ \approx 150$  (superfície livre).

Isso, em termos simples, equivale a responder de que forma a energia relacionada ao movimento do fluido está distribuída entre os turbilhões de vários tamanhos. As figuras mostram o comportamento das diferentes escalas de vórtices associadas à cascata de energia, em que os vórtices maiores vão sendo decompostos em vórtices menores até serem dissipados pelo efeito da viscosidade. Esta cascata de energia pode ser visualizada através do espectro turbulento. Nos espectros apresentados é possível identificar diferentes regiões características, de acordo com as diferentes dimensões dos vórtices existentes no escoamento.

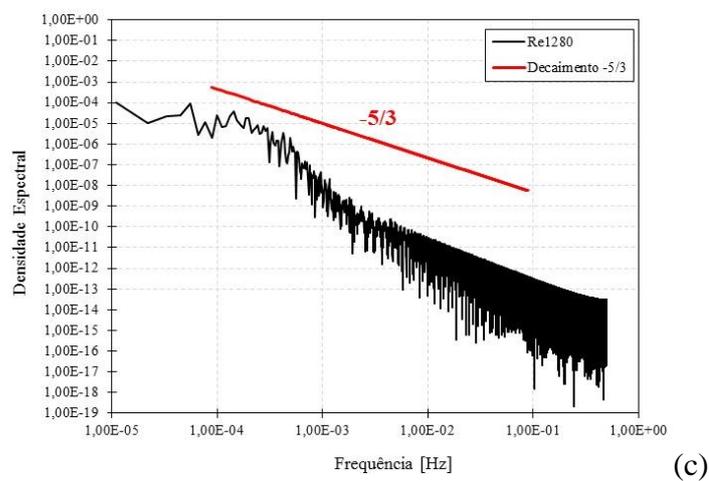
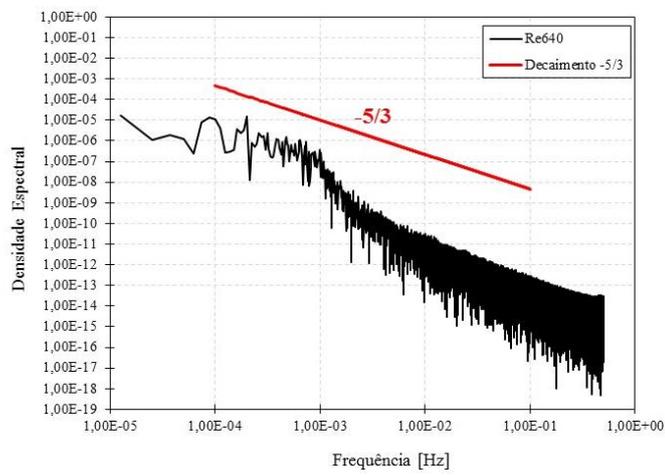
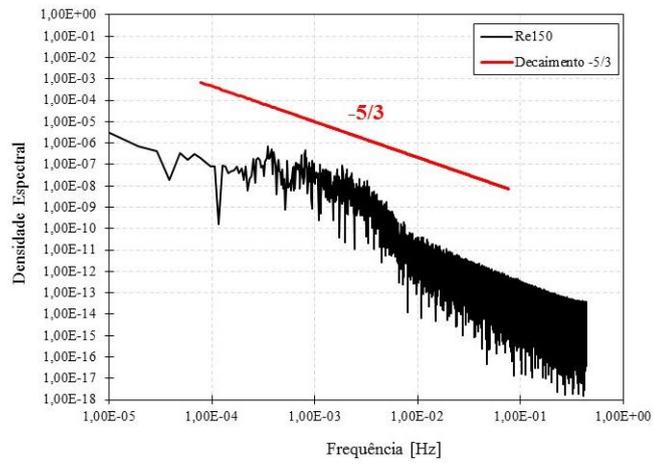


Figura 5.23 – Densidade espectral da velocidade longitudinal em um ponto localizado em  $y^+=150$  (a)  $Re=150$  (b)  $Re=640$  e (c)  $Re=1280$

#### **5.4.1.4 Perfil vertical de concentração média**

A sequência de gráficos da Figura 5.24 (a) a Figura 5.24 (c) refere-se aos perfis verticais de concentração média calculados para diferentes números de Reynolds e números de Schmidt: (a)  $Sc=1$  variando Reynolds (b)  $Sc=200$  variando Reynolds e (c)  $Sc=580$  variando Reynolds.

É notável que para altos valores do número de Reynolds, a espessura da subcamada difusiva é menor, diminuindo a medida que o número de Reynolds aumenta. A interpretação física do que está ocorrendo nas curvas da Figura 5.24 está diretamente associada ao texto explicativo da Seção 5.4.1.1 quanto ao entendimento da influência do número de Reynolds na distribuição do divergente de superfície.

Para todos os números de Schmidt pudemos confirmar as interpretações fornecidas anteriormente. Na Figura 5.24 (a), em que a grandeza escalar possui número de Schmidt igual a 1, o aumento do número de Reynolds modifica bastante a forma do perfil notadamente próximas as superfícies livre e da superfície inferior. Especificamente relativo aos objetivos do presente trabalho, o gradiente de concentração média na superfície livre sofre alterações importantes à medida que o número de Schmidt aumenta, estas influências do número de Reynolds são mais perceptíveis nesses perfis, porém são sentidas especialmente no cálculo do coeficiente de transferência de massa, o qual depende do gradiente de concentração.

### **5.4.2 Influência do número de Schmidt no escoamento e no transporte escalar**

#### **5.4.2.1 Estatísticas da turbulência**

Nesta seção serão exibidos perfis verticais das estatísticas de turbulência do escoamento e transporte de escalar construídos no centro do domínio para diferentes valores de número de Schmidt. Dessa forma, as curvas da Figura 5.25 (a) a Figura 5.25 (f) representam as seguintes variáveis (i) da média da concentração e (ii) RMS da flutuação da concentração.

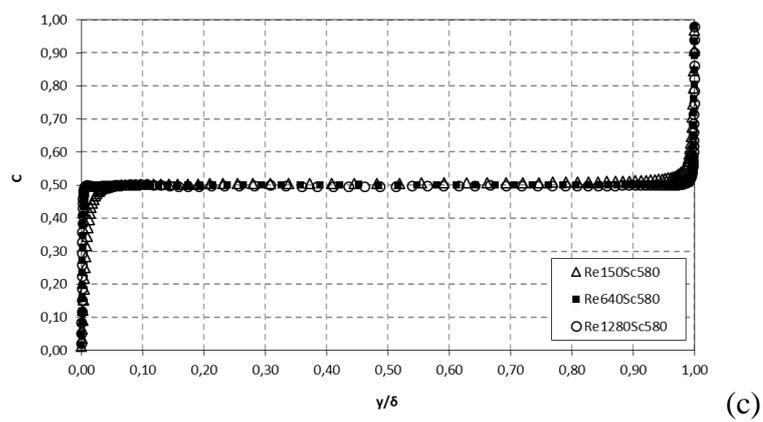
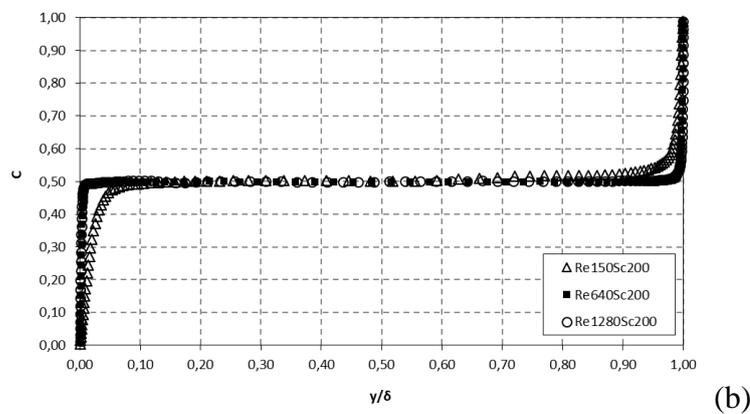
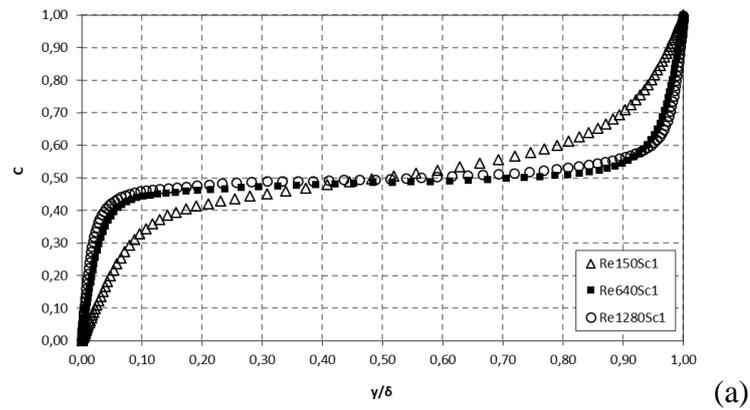


Figura 5.24 – Perfis de concentração média para diferentes números de Schmidt (a)  $Sc=1$  (b)  $Sc=200$  e (c)  $Sc=580$

As curvas da Figura 5.25(a) a Figura 5.25(c) apresentam dados médios de concentração no perfil vertical localizado no centro do domínio. A Figura 5.25 (a) refere-se ao número de Schmidt igual a 1, Figura 5.25 (b) ao número de Schmidt igual a 200 e a Figura 5.25 (c) ao

composto com número de Schmidt igual a 580. As curvas apresentadas da Figura 5.25 (d) a Figura 5.25 (f) mostram os perfis de RMS da flutuação da concentração dado por  $rms C'^+ = rms C'/C_*$ . A Figura 5.25 (d) refere-se ao número de Schmidt igual a 1, Figura 5.25(e) ao número de Schmidt igual a 200 e a Figura 5.25 (f) ao composto com número de Schmidt igual a 580. As Figura 5.25 (d) refere-se ao número de Schmidt igual a 150, Figura 5.25 (e) ao número de Schmidt igual a 200 e a Figura 5.25 (f) ao composto com número de Schmidt igual a 580.

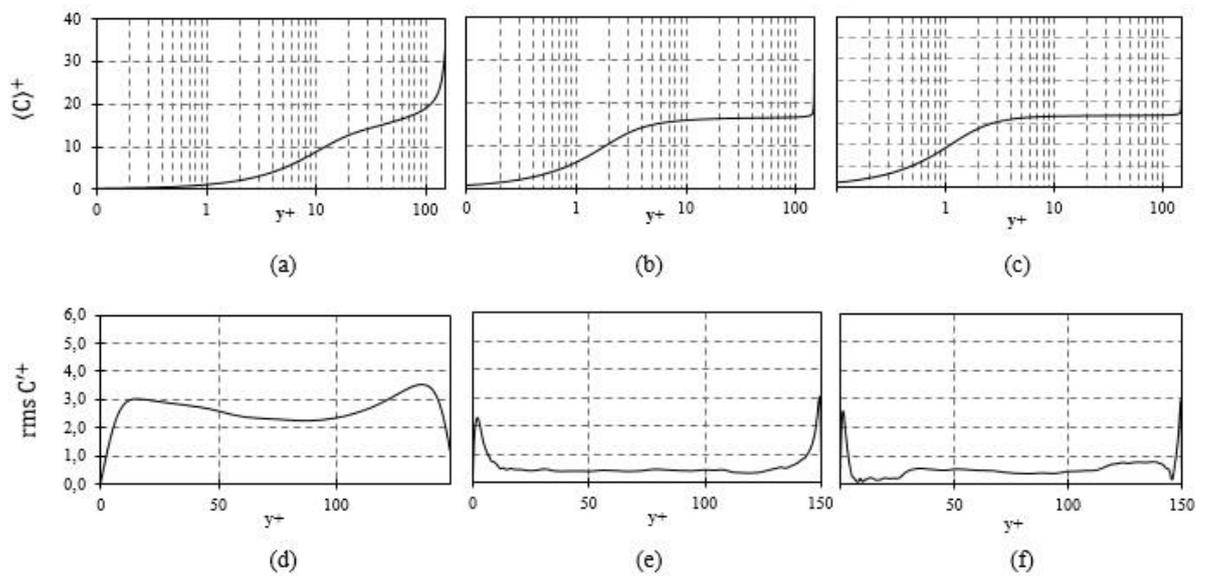


Figura 5.25 – Estatística do transporte de escalar: concentração média para (a)  $Sc=1$ , (b)  $Sc=200$  e (c)  $Sc=580$ ; RMS da flutuação de concentração para (d)  $Sc=1$ , (e)  $Sc=200$  e (f)  $Sc=580$ .

As curvas apresentadas na Figura 5.25 (a) a Figura 5.25 (c) referem-se aos valores de concentração médios obtidos pelo presente estudo. As curvas apresentam formas similares, no entanto, próximo à superfície livre devido ao elevado gradiente de concentração, a curva é notadamente mais acentuada para valores de número de Schmidt mais elevados. As curvas da Figura 5.25 (d) a Figura 5.25 (f) apresentam os valores de RMS da flutuação de concentração em um perfil vertical localizado no centro do domínio. A evolução das curvas é bastante similar para os três números de Schmidt estudados, no entanto, é possível observar-se que, para maiores números de Schmidt o valor máximo da flutuação de concentração encontra-se mais próximo da superfície livre. Em termos de distância dimensional, os picos estão localizados em  $y/\delta = 0,89, 0,995$  e  $0,998$ , respectivamente, para os números de Schmidt igual a 1, 200 e 580. Outra

importante análise a ser feita, se refere ao brusco decaimento dos valores de RMS da flutuação da concentração na direção ao seio do escoamento, para maiores números de Schmidt, o que não é facilmente notado para o número de Schmidt igual a unidade e é evidente para os números de Schmidt iguais a 200 e 580.

Como a atual discussão diz respeito ao mesmo de Reynolds e diferentes números de Schmidt, a redução da difusividade ocasiona a redução nas variações dos valores de concentração.

#### **5.4.2.2 Perfil vertical de concentração instantânea**

A Figura 5.26 exibe o campo de concentração instantâneo para um único número de Reynolds ( $Re=150$ ) e diferentes números de Schmidt ( $Sc=1,200$  e  $580$ ). As distribuições estão mostradas em um plano vertical transversal ao escoamento ( $yz$ ). As imagens foram feitas em  $t^+ = 3500$ .

A identificação no canto superior direito de cada plano corresponde a simulação realizada. É notável que para baixos valores do número Schmidt, o escalar é facilmente transportado. Como está sendo comparado um único número de Reynolds, as análises e variáveis percebidas são focadas e dependentes da difusividade do composto.

Como o número de Schmidt é a razão entre a viscosidade cinemática e a difusividade do composto, quanto maior o valor do número de Schmidt, menor a difusividade do composto para uma dada temperatura. Assim, para o número de Schmidt igual a 580, o transporte da grandeza escalar ocorre de forma muito mais lenta.

Sendo a condição de contorno de concentração na superfície livre constante e igual a 1, o transporte do escalar ocorre na direção do seio do escoamento proveniente da superfície livre. Na Figura 5.26 (a) concentrações instantâneas na faixa de  $0,15 - 0,35$  são notadas em alturas do canal iguais a aproximadamente  $0,25\delta$ . Isso dificilmente ocorre nas imagens da Figura 5.26 (b) e Figura 5.26 (c) em que essa faixa de concentração é visualizada em apenas uma pequena espessura próxima à superfície.

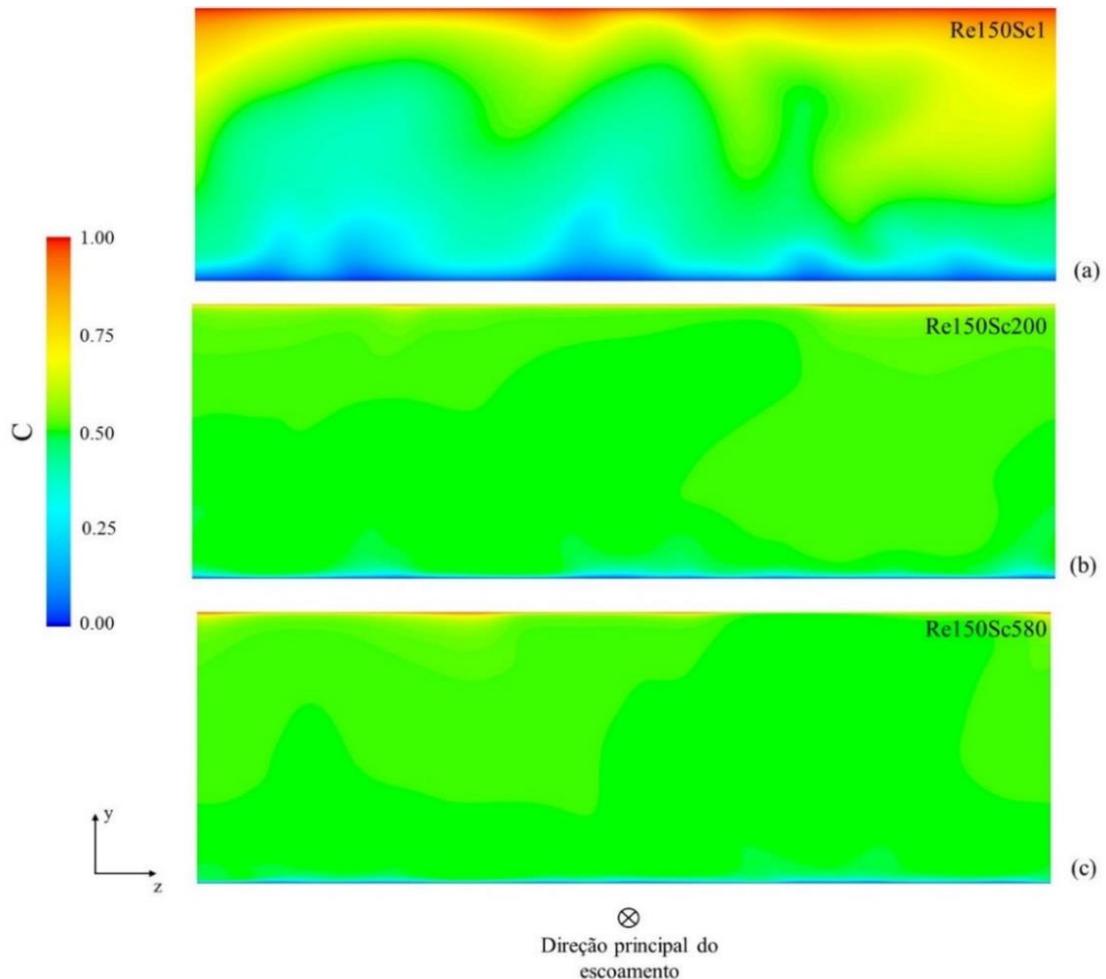


Figura 5.26 - Visualização do campo escalar instantâneo para diferentes números de Schmidt e um único número de Reynolds ( $Re=150$ ) em plano  $yz$  (a)  $Re150Sc1$ , (b)  $Re150Sc200$  e (c)  $Re150Sc580$  em  $t^+ = 3500$ .

A Figura 5.27 referem-se aos perfis de concentração média calculados para diferentes números de Schmidt e números de Reynolds: (a)  $Re=150$  variando  $Sc$ , (b)  $Re=640$  variando  $Sc$  e (c)  $Re=1280$  variando  $Sc$ . Os perfis verticais da média de concentração refletem o que foi anteriormente discutido nas distribuições de concentração instantâneas.

Os perfis referentes ao número de Schmidt igual a unidade (independentemente do número de Reynolds) são facilmente identificados nesse tipo de análise comparativa. Os gradientes são muito maiores nos números de Schmidt igual a 1 do que os apresentados nos compostos com número de Schmidt igual a 200 e 580. Para maiores números de Reynolds, os perfis verticais

correspondentes aos números de Schmidt iguais a 200 e 580 praticamente se confundem dada a pequena escala de variação de concentrações.

A informação mais importante a ser extraída destes perfis é o fato de que a espessura da camada limite de concentração é significativamente reduzida com o aumento dos números de Schmidt e Reynolds.

### 5.4.3 Análise da influência dos parâmetros governantes na transferência de massa

Esta última subseção da seção de resultados e discussões tem como objetivo apresentar uma compilação de todas as 9 simulações LES realizadas neste trabalho, por meio do principal parâmetro de interesse apresentado nos objetivos que é o coeficiente de transferência de massa na fase líquida ( $k_l$ ). A teoria referente ao  $k_l$  está apresentada e interpretada na Seção 2.3. O coeficiente de transferência de massa da grandeza escalar na fase líquida é uma expressão da taxa média de transferência em superfície livre.

A expressão apresentada na Subseção 2.3.1 (Eq. 2.6) mostra o cálculo do coeficiente  $k_L$  baseado nos valores da difusividade do composto na fase líquida ( $D_l$ ) e na espessura do filme ( $d_l$ ). A espessura do filme é parâmetro de difícil medição experimental ou mesmo cálculo por simulações numéricas. O seu cálculo é então feito graças a uma aproximação da curva concentração vs. distância a partir da interface, dada a ínfima espessura dessa camada.

Dessa forma a espessura pode ser aproximada por  $\Delta C / (\partial \langle C \rangle / \partial y)$  sendo  $\Delta C = 1 - C_b$  e  $C_b$  é a concentração no seio do escoamento, definida por McKenna e McGillis (2004) como sendo a concentração em  $y = 0,6\delta$ . O gradiente de concentração média  $\partial \langle C \rangle / \partial y$  é calculado em  $y = \delta$ , ou seja, na interface.

Observando os gráficos da Figura 5.24 e Figura 5.27 pode-se notar que o valor de  $C_b$  apresenta valores muito similares em todos os casos testados, esses próximos a 0,5. Já o gradiente é um cálculo muito sensível quanto às concentrações próximas à interface, ou seja, mesmo as variações imperceptíveis do perfil de concentração como nos casos Re1280Sc200 e Re1280Sc580 tem-se variações do gradiente que influenciam significativamente no valor de  $k_l$ .

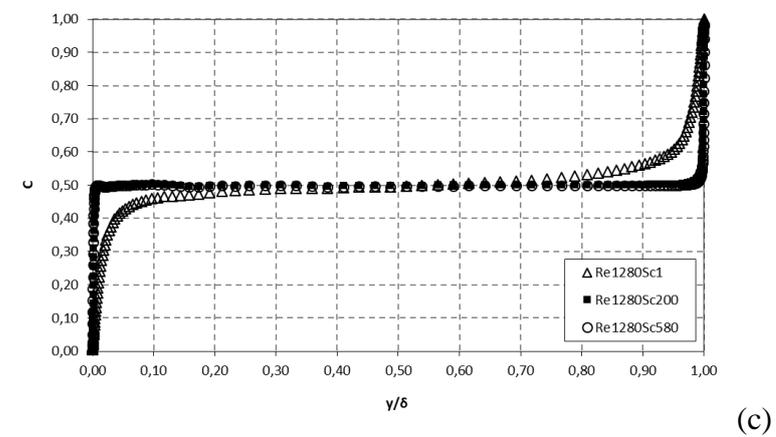
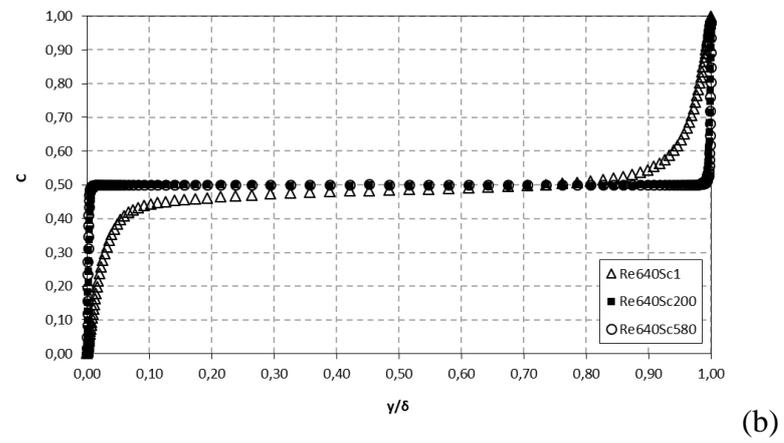
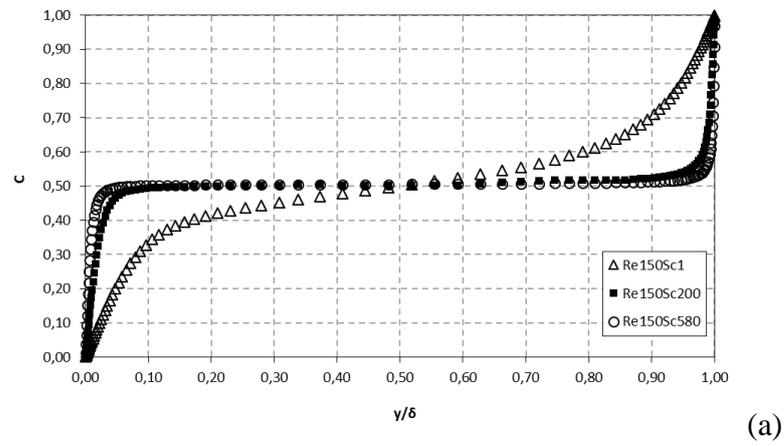


Figura 5.27 – Perfis verticais de concentração média para diferentes números de Reynolds  
 (a)  $Re=150$  (b)  $Re=640$  e (c)  $Re=1280$

A Figura 5.28 compara os resultados de  $k_l$  calculados pelo presente estudo com os dados experimentais de McKenna e McGillis (2004) os quais indicam a relação  $k_l/u = -0,072Sc^{1/2}$ .

Na Figura 5.28,  $k_l$  é normalizado pela velocidade no seio do escoamento  $y = 0,6\delta$  que é correspondente a  $u = 0,7u_*$ . Uma análise detalhada do gráfico revela que para o mesmo número de Schmidt os valores adimensionais do coeficiente de transferência de massa estão em boa concordância.

Para o caso  $Re150Sc580$  observa-se, no entanto, uma ligeira sobreestimativa, mesmo assim o valor obtido pelo presente estudo encontra-se muito próximo da relação experimental.

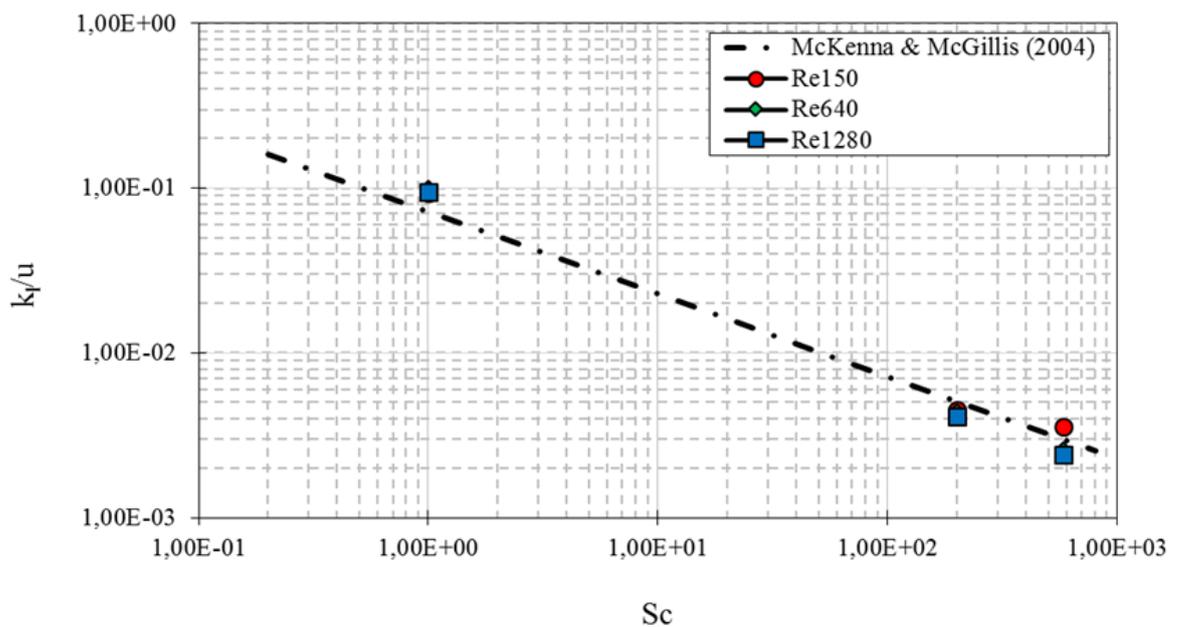


Figura 5.28 – Coeficiente de transferência de massa para diferentes números de Reynolds:  $Re=150$ ,  $Re=640$  e  $Re=1280$ .

A boa concordância com a relação experimental assegura a correta realização das simulações numéricas LES quanto ao transporte de escalar em uma camada limite turbulenta. A Figura 5.29 e a Tabela 5.3 complementam a discussão e sintetizam a relação entre os números de Schmidt e Reynolds e o coeficiente de transferência de massa na fase líquida obtidos por simulação numérica em um gráfico tridimensional.

Tabela 5.3 – Coeficientes de transferência de massa na fase líquida,  $k_l$  [m/s]

Sc \ Re	150	640	1280
1	$1,64 \cdot 10^{-4}$	$7,66 \cdot 10^{-4}$	$1,13 \cdot 10^{-3}$
200	$7,85 \cdot 10^{-6}$	$3,36 \cdot 10^{-5}$	$1,97 \cdot 10^{-5}$
580	$6,26 \cdot 10^{-6}$	$4,88 \cdot 10^{-5}$	$2,85 \cdot 10^{-5}$

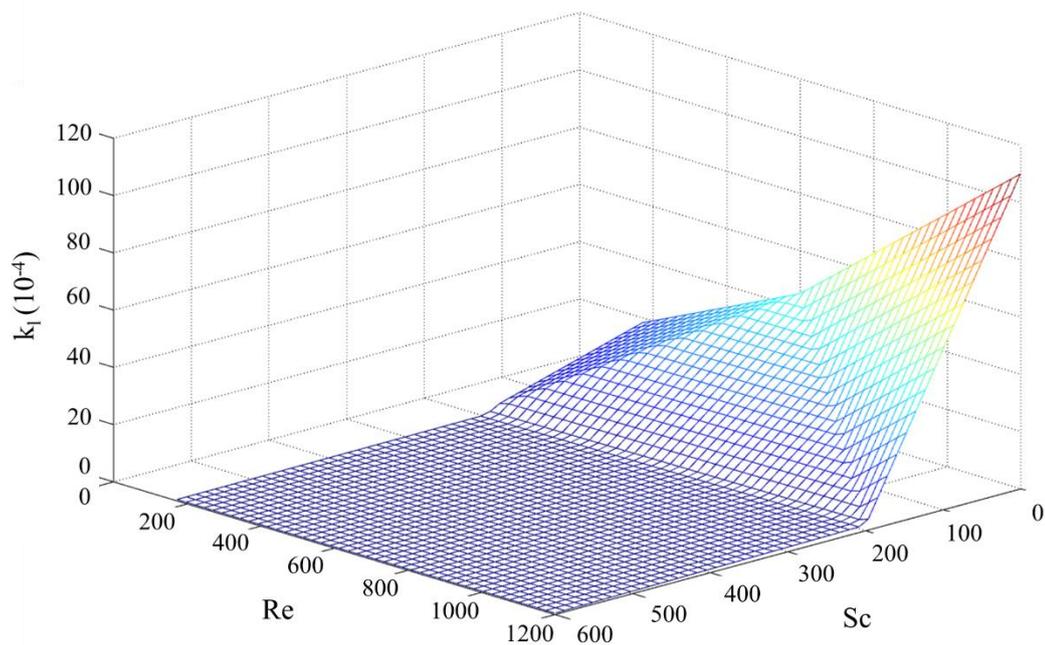


Figura 5.29 – Variação do coeficiente de transferência de massa com o número de Schmidt e número de Reynolds

Recapitulando a teoria dos filmes apresentada na seção 2.3 pode ser visto que o coeficiente de transferência de massa na fase líquida é parâmetro essencial no cálculo do fluxo do composto que é transferido por volatilização da fase líquida para a fase gasosa.

O valor do fluxo é dependente das seguintes variáveis além do coeficiente de transferência de massa: concentração do composto no seio do escoamento da fase líquida, concentração do composto no seio da fase gasosa e constante da lei de Henry.

Uma análise mais detalhada da Figura 5.29 permite algumas conclusões no que diz respeito ao fluxo do composto emitido por volatilização. Para um dado composto e fixando as concentrações de seio do escoamento em uma análise comparativa, o aumento do número de Reynolds, por exemplo, de 150 para 1280, implica em um aumento de fluxo da ordem de 7 vezes para o composto de número de Schmidt igual a 1. Para um composto cujo número de Schmidt é igual a 580, este aumento é da ordem de 5 vezes. De fato, o aumento do número de Reynolds do escoamento, como mostrado por variadas vezes durante o presente trabalho, acarreta o aumento das estruturas turbulentas, responsáveis pela movimentação ascendente do fluido que pode ocasionar o aumento das emissões do composto.

O estudo de referência de Nagaosa (1999) apresenta uma discussão do valor do número adimensional de Sherwood ( $Sh$ ) para a simulação do caso base,  $Re = 150$  e  $Sc = 1$ . O número de Sherwood representa a razão da transferência de massa por advecção e por difusão, a qual é dada pela expressão  $Sh = k_l \delta / D$  onde  $k_l$  é o coeficiente de transferência de massa na fase líquida,  $\delta$  é a altura do canal e  $D$  a difusividade do composto dissolvido. No estudo de DNS de Nagaosa (1999) o número de Sherwood avaliado foi de 4,76, enquanto no presente estudo o valor obtido foi muito próximo sendo igual a 4,69. Essa análise indica que o modelo utilizado no presente estudo tem ótima predição quanto aos processos de transferência de massa por advecção e difusão esses analisados quantitativamente pelo número de Sherwood.

Finalizando, foi investigada a dependência do coeficiente de transferência de massa na fase líquida em relação ao número de Reynolds e número de Schmidt. Conforme estudo de Magnaudet e Calmet (2006), a relação  $k_l/u$  pode ser expressa por  $\alpha Sc^{-1/2} Re^{-1/4}$ . O valor de  $\alpha$  obtido a partir das simulações realizadas no presente estudo foi de 0,29, enquanto o valor obtido pelo estudo de Magnaudet e Calmet (2006) foi de 0,31. A boa concordância desse parâmetro indica a boa qualidade das simulações LES da transferência da grandeza escalar.

## 6 Conclusões e recomendações para trabalhos futuros

No presente estudo, foi avaliada a influência do número de Reynolds e do número de Schmidt na transferência de massa. As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química foram resolvidas com o uso do código FLUENT que utiliza o método dos volumes finitos. Os efeitos da turbulência foram tratados através da metodologia LES com modelagem dinâmica de submalha. A metodologia LES com modelo de submalha dinâmico teve bom desempenho na região de estudo, próxima à superfície livre, onde a malha foi refinada para que a transferência de massa pudesse ser investigada de forma criteriosa.

Na investigação da fase líquida não foram considerados aspectos como contaminação e deformação da superfície. Os principais avanços teóricos obtidos com os resultados deste trabalho foram: (i) investigação com LES do escoamento turbulento próximo a superfície livre, (ii) estudo dos efeitos das estruturas turbulentas encontradas próximo à superfície livre na transferência de massa e (iii) estudo da influência dos parâmetros governantes das simulações no escoamento e na transferência de massa (números de Reynolds e Schmidt).

Três etapas integraram o presente estudo. (i) Validação do modelo matemático e técnicas de simulação numérica, (ii) avaliação qualitativa e quantitativa de um caso base e (iii) avaliação da influência dos números de Reynolds e Schmidt sobre as características do escoamento e da transferência de massa.

A primeira etapa referente às simulações de validação do modelo matemático considerou a configuração utilizada por Nagaosa (1999) e Nagaosa e Handler (2003) e objetivou a reprodução dos resultados numéricos obtidos por DNS. Os resultados do presente estudo (médias, flutuações e correlações dos campos de velocidade e da grandeza escalar) obtiveram boa concordância com os resultados de DNS dos estudos de referência supracitados.

Validado o modelo, a segunda etapa consistiu em avaliar qualitativamente e quantitativamente um caso base (fixando um par de números de Reynolds e Schmidt). As análises qualitativas propuseram a avaliação de gráficos de distribuição de vorticidade, concentração instantânea,

flutuação de concentração, distribuição dos vetores velocidade instantânea, divergente de superfície e visualização de vórtices por meio da técnica critério  $Q$ . As principais conclusões dos gráficos qualitativos são as associações observadas entre as formações e desenvolvimento de estruturas turbulentas e o transporte da grandeza escalar na região bem próxima à interface líquido-gás, região na qual será calculado o coeficiente de transferência de massa.

O critério  $Q$  foi usado para identificação e visualização de vórtices. Essa técnica se baseia na construção de isosuperfícies como resultado do cálculo que indica as regiões do domínio em que a rotação predomina em relação à deformação cisalhante. Maiores números de Reynolds permitiram a identificação de um número maior de vórtices se considerada a mesma faixa do critério  $Q$ . No caso base essa técnica foi importante para a identificação de dois vórtices contrarotativos bem próximos à interface líquido-gás. Esses vórtices, para o instante em questão, são os responsáveis por uma grande movimentação do escalar na superfície livre. A distribuição do divergente de superfície na interface associa também a movimentação do fluido com a transferência de massa do composto. De um modo geral, divergentes de superfície positivos relacionam-se a movimentos ascendentes do fluido, cuja tendência é promover uma redução da concentração local dado que do seio do escoamento até a parede inferior as concentrações são menores. Divergentes de superfície negativos correspondem à movimentação do fluido na direção do seio do escoamento e conseqüente transporte do escalar dado que esse tem condição de contorno com valor máximo de concentração na parede superior.

Por fim, a terceira e última etapa avaliou a influência dos parâmetros governantes adimensionais do presente trabalho. Foram investigados escoamentos com diferentes números de Reynolds (150, 640 e 1280) e diferentes números de Schmidt (1,200 e 580). As mesmas variáveis discutidas na análise quantitativa e qualitativa do caso base forma revisitadas na avaliação da influência dos parâmetros governantes. As principais estatísticas da turbulência (momentos de 1ª ordem e 2ª ordem) são apresentadas para diferentes números de Reynolds e números de Schmidt.

Para todos os números de Reynolds a evolução do perfil de velocidade longitudinal média está em concordância com a teoria da camada limite turbulenta em canal aberto. Quanto à produção de turbulência indicada pelos perfis de RMS da flutuação de concentração foi observado que o pico ocorre em uma mesma posição adimensional do perfil vertical com o aumento de Reynolds. A produção de vórtices, quantificada pelo RMS da flutuação das vorticidades, é

bastante similar se comparados os números de Reynolds investigados. O máximo valor do RMS da vorticidade ocorre na parede e para direção transversal. Os valores adimensionais do RMS da flutuação de cada componente decaem com o aumento do número de Reynolds, resultado esperado e encontrado na literatura.

Na análise do escalar para variações do número de Reynolds foi inicialmente notada a modificação da forma da curva na região próxima à parede indicando a modificação na subcamada difusiva. O pico da flutuação de concentração ocorre em diferentes posições verticais, variando consideravelmente quando modificamos o valor do número de Reynolds: de  $y/\delta=0,89$  para número de Reynolds igual a 150 até  $y/\delta=0,98$  para número de Reynolds igual a 1280. A influência sobre o fluxo turbulento escalar mostra que o aumento do número de Reynolds causa o aumento da camada em que o fluxo turbulento do escalar é mais próximo do fluxo turbulento total.

A modificação do número de Schmidt é mais evidente nos perfis verticais de concentração média, flutuação e fluxo turbulento. O gradiente vertical de concentração média é muito reduzido com o aumento do número de Schmidt. O pico de RMS de flutuação de concentração também se aproxima bastante da superfície, de forma mais intensa que nos casos onde o número de Reynolds é modificado.

A influência do número de Reynolds e do número de Schmidt no coeficiente de transferência de massa na fase líquida foram avaliadas. Maiores números de Reynolds promovem maior mistura no seio do escoamento, diminuem a espessura da subcamada viscosa e aumentam o gradiente de concentração e conseqüentemente o coeficiente de transferência de massa. Com relação ao número de Schmidt, maiores valores desse parâmetro correspondem a compostos com menor difusividade, sendo portanto, mais lenta a difusão e menor o coeficiente de transferência de massa. O coeficiente de transferência de massa na fase líquida é uma variável necessária na determinação do valor numérico do fluxo de composto emitido à atmosfera a partir da interface quiescente. Outros parâmetros importantes como as concentrações de seio de escoamento em ambas as fases e a constante de Henry são necessários para o cálculo do fluxo de composto emitido. Os resultados indicaram uma elevação do fluxo em até 7 vezes com o aumento de Reynolds para o número de Schmidt igual a 1. No caso do sulfeto de hidrogênio ( $Sc = 580$ ), a elevação do fluxo é reduzida para 5 vezes para número de Reynolds igual a 1280

em relação à  $Re = 150$ . Esses resultados mostram que o mesmo aumento da turbulência do escoamento tem efeito ligeiramente diferente entre os números de Schmidt testados.

## 6.1 Recomendações para trabalhos futuros

Mais investigações para provar a adequação da proposta do modelo são necessárias para incorporar os resultados de experimentos de laboratório da hidrodinâmica interfacial e a transferência de massa em uma maior faixa de parâmetros, em especial para maiores números de Reynolds. Interessante também seria a investigação de outros compostos odorantes, com a realização de novas simulações com outros números de Schmidt

Considerações adicionais são necessárias para quantificar as escalas de comprimento característicos na região próxima à interface com base nas estatísticas obtidas neste trabalho. Outras malhas computacionais poderiam ser testadas com vistas a obtenção, com variações do número de elementos também nas direções transversal e longitudinal ao escoamento.

Apesar da literatura apontar para um bom desempenho do modelo de submalha utilizado, é recomendável um estudo com outros modelos de submalha, objetivando a determinação de sua influência no coeficiente de transferência de massa. Além disto, outras formulações específicas para superfície livre, tais como as estudadas por Shen e Yue (2001) podem apresentar bons resultados.

Com relação ao coeficiente de transferência de massa, a inclusão da fase gasosa ao domínio, contemplaria a parcela deste coeficiente não computada no cálculo da taxa de emissão. Recomendável também o estudo de caso em que a deformação da superfície seja considerada. Um avanço na investigação da transferência de massa por simulações numérica pode se dar na modificação das condições de contorno de cisalhamento nas paredes superior e inferior e sua influência na formação das estruturas turbulentas próximo a interface líquido-gás (Calmet et Magnaudet, 1998). A condição de contorno de superfície livre poderia ser modificada para a condição de cisalhamento definido. Ainda, na superfície inferior a condição de não deslizamento poderia ser modificada para deslizamento livre.

## Bibliografia

Abba, A., Cercignani, C. & Valdetarro, L., 2003. Analysis of subgrid scale models. *Pergamon Computers and Mathematics with applications*, Volume 46, pp. 521-535.

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

Bardina, J., Ferziger, J. & Reynolds, W. C., 1980. Improved subgrid scale models for large eddy simulation. *AIAA*, pp. 80-1357.

Blunden, J., Aneja, P. & Overton, J., 2008. Modeling hydrogen sulfide emissions across the gas - liquid interface of an anaerobic swine waste treatment storage system. *Atmospheric Environment*, Volume 42, pp. 5602-5611.

Calmet, I. & Magnaudet, J., 1996. Large-eddy simulation of high-Schmidt number mass transfer in a turbulent channel flow. *Phys. Fluids*, Volume 9, p. 438-455.

Calmet, I. & Magnaudet, J., 1998. High-Schmidt number mass transfer through turbulent gas-liquid interfaces. *Intl J. Heat Fluid Flow*, p. 522-532.

Calmet, I. & Magnaudet, J., 2003. Statistical structure of high-Reynolds-number turbulence close to the free surface of an open-channel flow. *J. Fluid. Mech*, Volume 474, p. 355-378..

Chao, H.-P., Lee, J.-F. & Huang, H.-C., 2005. An alternative method for predicting organic. *Chemosphere*, 59(5), p. 711-720..

Chock, D. P. & Carmichael, G. R., 2000. *Atmospheric modeling*. New York: Institute for mathematics and its applications.

Dong, Y.-H., Xi-Yun, L. & Zhuang, L.-X., 2003. Large eddy simulation of turbulent channel flow with mass transfer at high Schmidt numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 46, pp. 1529-1539.

- Fulgosi, M., Lakehal, D. & Banerjee, S., 2003. Direct numerical simulation of turbulence in a sheared air–water flow with a deformable interface. *J. Fluid Mech.*, p. 319–345.
- Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. & Cabot, W., 1991. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids*, 3(7), pp. 1760-1765.
- Gostelow, P., 2002. *The modelling of odours from sewage treatment works*. U.K.: Tese de doutorado - Cranfiel Univerty .
- Hasegawa, Y. & Kasagi, N., 2009. Hybrid DNS/LES of high Schmidt number mass transfer across turbulent air-water interface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 52, pp. 1012-1022.
- Hudson, N. A. G., 2008. Odour sampling 1: Physical chemistry considerations. *Bioresource Technology*. p. 3982–3992.
- Hutchinson, B. & Raihby, G., 1986. A multigrid method based on the additive correction strategy. *Numerical heat transfer*, Volume 9, pp. 511-537.
- Jahne, B. & Haußecker, H., 1998. Air-water gas exchange, *Annu. Rev. Fluid Mech* 30, 443–68. *Annu. Rev. Fluid Mech*, Volume 30, p. 443–68.
- Janzen, J. G., 2006. *Fluxo de massa na interface ar-água em tanques de grades oscilantes e detalhes de escoamentos turbulentos isotrópicos*. Tese de Doutorado. São Carlos: Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.
- Jiang, X. & Lai, C.-H., 2009. *Numerical Techniques for Direct and Large Eddy Simulations*. s.l.:CRC Press.
- Khakpour, H. R., Igusa, T. & Shen, L., 2012. Coherent vortical structures responsible for strong flux of scalar at free surface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, pp. 5157-5170.
- Kim, J., Moin, P. & Moser, R., 1987. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 177, pp. 133-166.
- Komori, S. et al., 2010. Direct numerical simulation of wind-driven turbulence and scalar transfer at sheared gas–liquid interfaces. *Journal of Turbulence*, p. 11.

- Komori, S., Murakami, Y. & Ueda, H., 1989. The relationship between surface-renewal and bursting motions in an open-channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 203, pp. 103-123.
- Komori, S., Nagaosa, R. & Muralami, Y., 1990. Mass transfer into a turbulent liquid across the zero shear gas liquid interface. *AIChE Journal*, Volume 36.
- Kumar, S., Gupta, R. & Banerjee, S., 1998. An experimental investigation of the characteristics of free-surface turbulence in channel flow. *Physics of Fluids*, Volume 10(2), pp. 437-456.
- Leonard, A., 1974. Energy cascade in large eddy simulation of turbulent fluid flow. *Advanced Geophysics*, Volume 8, pp. 237-248.
- Leonard, B., 1991. The ultimate conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Volume 88, pp. 17-74.
- Lilly, D., 1992. A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method. *Phys. Fluids A*, 4(3), pp. 633-635.
- Lombardi, P., De Angelis, V. & Banerjee, S., 1996. Direct numerical simulation of near-interface turbulence in coupled gas-liquid flow. *Phys. Fluids*, 8(6).
- Mackay, D. & Yeun, A., 1983. Mass transfer coefficient correlations for volatilization of organic solutes from water. *Envir. Sci. Technology*.
- Magnaudet, J. & Calmet, I., 2006. Turbulent mass transfer through a flat shear -free surface. *Journal Fluid Mech*, Volume 553, pp. 155-185.
- Mathpati, C. & Joshi, J., 2007. 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*, Volume 46, pp. 8525-8557.
- McDonough, J. M., 2007. *Introductory lectures on turbulence - physics, mathematics and modeling*. 2<sup>a</sup> ed. Kentucky: USA.

- McKenna, S. & McGillis, W., 2004. The role of free-surface turbulence and surfactants in air–water gas transfer. *Intl J. Heat Mass Transfer*, Volume 47, pp. 539-553.
- Munz, C. & Roberts, P. V., 1989. Gas and liquid phase mass transfer resistances of organic compounds during mechanical surface aeration. *Water research*, Volume 23, pp. 589-601.
- Nagaosa, R., 1999. Direct numerical simulation of vortex structures and turbulent scalar transfer across a free surface in a fully developed turbulence. *Phys. Fluids*, Volume 11.
- Nagaosa, R., 2005. *A numerical revisit on mass transfer experiments at a free surface in a turbulent open channel flow*. AIST Tsukuba West, 05AICHE - Annual meeting.
- Nagaosa, R., 2010. Prediction of Turbulent Scalar Fluxes at a Shear-free Gas-liquid Interface Based on Surface Divergence. *The International Society of Offshore and Polar Engineers (ISOPE)*, pp. 1123-1128.
- Nagaosa, R. & Handler, R. A., 2003. Statistical analysis of coherent vortices near a free surface in a fully developed turbulence. *Phys. Fluids*, Volume 15, pp. 375-394.
- Nagaosa, R. & Handler, R. A., 2011. In-silico experiments on characteristic time scale at a shear-free gas-liquid interface in fully developed turbulence. *Journal of Physics: conference series 318(2011)*, Volume 4.
- Nagaosa, R. & Handler, R. A., 2012. Characteristic Time Scales for Predicting the Scalar Flux at a Free Surface in Turbulent Open-Channel Flows. *AIChE*, Volume 58.
- Patankar, S. V., 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. 2 ed. s.l.:Hemisphere Publishing Corporation.
- Pope, S. B., 2000. *Turbulent flows*. New York: Press Syndicate of the University of Cambridge.
- Reboux, S., Sagaut, P. & Lakehal, D., 2006. Large eddy simulation of sheared interfacial flow. *Physics of fluids*, Volume 18, pp. 105105-1 - 105105-15.
- Sagaut, P., 1998. *Large Eddy Simulation for Incompressible flow*. Chantillon - França: Springer.

- Salvetti, M. & Banerjee, S., 1995. Apriori tests of a new dynamic subgrid-scale model for finite-difference large eddy simulations. *Physics of Fluids*, 7(11), pp. 2831-2847.
- Salvetti, M. V., Zang, Y., Street, R. L. & Banerjee, S., 1997. Large-eddy simulation of free-surface decaying turbulence with dynamic subgrid-scale models. *Phys. Fluids*, pp. 2405-2419.
- Sander, R., 1999. *Compilation of Henry's Law Constants for Inorganic and Organic Species of Potential Importance in Environmental Chemistry*. Mainz - Alemanha: Max-Planck Institute of Chemistry.
- Santos, J. M. et al., 2012. An experimental determination of the H<sub>2</sub>S overall mass transfer coefficient from quiescent surfaces at wastewater treatment plants. *Atmospheric Environment*, Volume 60, pp. 18-24.
- Shaanan, S., Ferziger, J. & Reynolds, W., 1975. *Numerical simulation of turbulence in presence of shear*, Stanford University: Department of Mechanical Engineering.
- Shen, L. & Yue, D. K., 2001. Large-eddy simulation of free-surface turbulence. *J. Fluid Mech*, Volume 440, pp. 75-116.
- Smagorinsky, J., 1963. General circulation experiments with primitive equations – the basic equations. *Monthly Weather Review*, Volume 91, pp. 99-16.
- Stull, R. B., 1988. *An introduction to boundary layer meteorology*. Medison: Kluwer Academic Publishers.
- Vandormaal, J. & Raithby, G., 1984. Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical heat transfer*, Volume 7, pp. 147-163.
- Versteeg, H. & Malalasekera, W., 2007. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics - the finite volume method*. Essex : Pearson Education Limited.
- Whitman, W. G. & Lewis, W., 1924. Principles of gas absorption. *Ind. Eng. Chem*.
- Yu-Hong Dong, X.-Y. L. L. Z., 2003. Large Eddy Simulation of turbulent channel flow with mass transfer at high-Schmidt numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 46, pp. 1529-1539.

Zang, Y., Street, R. L. & Koseff, J. R., 1993. A dynamic mixed subgrid-scale model and its application to turbulent recirculating flows. 5(12), pp. 3186-3194.

Zhu, J. & Rodi, W., 1991. A low dispersion and bounded convection scheme. Volume 92, pp. 87-96.