Análise do escoamento e transferência de massa de um composto na fase líquida em tanques com diferentes aspectos sob a influência de ventos

Feroni, R. C.^{1,2*}; Galvão, E.S.¹; Andreão, W. L.¹; Moreira, D. M.²

¹ Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, Brasil.
² Departamento Regional da Bahia, Centro Integrado de Manufatura e Tecnologia, Salvador, BA, Brasil.

* e-mail: ritaferoni@gmail.com

Resumo

O estudo do escoamento da fase líquida, cuja interface líquido-gás está sob a influência da tensão de cisalhamento gerada pela velocidade do vento na superfície da água, é de ampla aplicação sendo visto em estudo de tanques, associados ou não a investigações como de transferência de massa. No presente trabalho, o escoamento e a transferência de massa dentro de um tanque foram estudados numericamente. As simulações foram realizadas para tanques de razão de aspecto (comprimento/altura) compreendidos entre 1 e 24 e para números de Reynolds compreendidos entre 16 e 1620. A transferência de massa foi investigada para o composto odorante sulfeto de hidrogêncio. Os resultados mostram que o escoamento na fase líquida é fortemente dependente da velocidade induzida na superfície pela fase gasosa e da relação de aspecto do tanque. Observou-se também que o valor do coeficiente de transferência de massa local médio é maior para tanques com razão de aspecto menor.

Abstract

The study of flow field of the liquid phase where the liquid-gas interface is under the influence of the shear stress on the water surface generated from of the wind speed is wide application as in study of tanks, associated or not to investigations of mass transfer. In this study, the flow field and mass transfer inside a tank were studied numerically. The simulations were realized for tanks aspect ratios (length/height) ranging from 1 and 24 and Reynolds numbers between 16 and 1620. The mass transfer was investigated for odorant compound hydrogen sulfide. The results show that the flow field in the liquid phase is strongly dependent on the surface speed induced by the gas phase and the tank aspect ratio. It was also observed that the average value of the local mass transfer coefficient is greater for tanks with smaller aspect ratio.

Keywords (Palavras chaves): razão de aspecto, número de Reynolds, escoamento, transferência de massa

1. Introdução

O escoamento de um fluido em um tanque é um problema clássico em mecânica dos fluidos e pode ser estudado através da fluidodinâmica computacional. A sua aplicação é ampla, como pode ser constatado em estudo de canais, tanques, lagoas, oceanos, associados ou não a estudo de transferência de massa, com superfície quiescente (superfície com baixo grau de agitação) em estudo de fase única [1], ou em estudos multifásicos com ou sem a formação de ondulações [2].

A volatilização de compostos dissolvidos em um líquido, a partir de um tanque com superfície livre quiescente, desempenha um papel importante em numerosos processos como em unidades de Estações de Tratamento de Esgoto (ETE) onde o sulfeto de

hidrogênio (H₂S) é tipicamente encontrado e pode ser volatilizado produzindo odor.

Estruturas que aparecem no interior do tanque com escoamento em regime laminar, cuja interface líquidogás está sob a influência da tensão de cisalhamento gerada pela velocidade do vento na superfície da água, são fortemente dependentes da relação de aspecto da cavidade (AR= comprimento/altura) e do número de Reynolds (Re) [1], [3] e [4]. Estas variáveis, o número de Schmidt (Sc) e a volatilidade do composto, são importantes para os estudos de transferência de massa [1], [3] e [4]. Os números de Reynolds e Schmidt podem ser definidos como:

$$\operatorname{Re} = \frac{\rho U_s H}{\mu} \tag{1}$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_l} \tag{2}$$

 μ é a viscosidade dinâmica do fluido e D_l é o coeficiente de difusão do composto. U_s é a velocidade na interface líquido-gás.

Dessa forma, para estudar o comportamento do escoamento de um fluido em um tanque em regime laminar e a transferência de massa de um composto da fase líquida através da interface líquido-gás, um modelo bidimensional foi utilizado. As simulações foram realizadas para tanques com *AR* entre 1 e 24 e para *Re* compreendidos entre 16 e 1620. Uma análise de transferência de massa também foi realizada para o H₂S cujo número de *Sc* é igual a 557.

2. Modelagem matemática e método numérico

O escoamento de um fluido em regime laminar e a emissão de um composto a partir de uma superfície livre são governados pelas equações de conservação de massa, quantidade de movimento e espécie química. Para superfícies quiescentes a volatilização é usualmente modelada através da teoria dos dois filmes que assume que do lado do líquido, próximo a interface, existe uma camada de espessura d_i onde a difusão molecular torna-se dominante no processo de transferência de massa. Para compostos com alta constante de Henry, onde a transferência de massa é controlada pela fase líquida [3] e [5], e pela diferença de concentração entre o seio da fase e a interface, o fluxo pode ser escrito pela Equação 3,

$$J_{Al} = k_l (C_{Al,0} - C_{Al,i}) \quad \text{com} \quad k_l = \frac{D_l}{d_l}$$
 (3)

onde, k_l é o coeficiente local de transferência de massa. D_l é o coeficiente de difusão. $C_{Al,0}$ é a concentração dissolvida do composto no interior do tanque, $C_{Al,i}$ é a concentração do composto na interface.

As equações são resolvidas considerando as condições de contorno e condições iniciais cujos valores podem ser vistos na Tabela 1, sendo que para os Casos 3 e 6 a equação de conservação da espécie química também é resolvida. Na superfície livre y = H, a velocidade na interface é assumida como constante e uma concentração igual a zero. As paredes verticais e o fundo do tanque são considerados como condição de não deslizamento e fluxo de massa nulo. Inicialmente o fluido dentro do tanque se encontra em repouso com uma concentração inicial $C_{Al,0_{l=0}}$.

Tabela 1 : Casos Simulados					
Caso	<i>L</i> (m)	<i>H</i> (m)	AR	<i>U</i> ₅ (m/s)	Re
1	0,6	0,6	1	3 ×10⁻⁵	16
2	0,6	0,6	1	3 ×10 ⁻⁴	162
3	0,6	0,6	1	3 ×10 ⁻³	1620
4	2,4	0,6	4	3 ×10⁻⁵	16
5	2,4	0,6	4	3 ×10 ⁻⁴	162
6	2,4	0,6	4	3 ×10 ⁻³	1620
7	12,5	0,2	24	1,1 ×10 ⁻¹	702

Os tanques simulados possuem *AR* baseada nos estudos [1] e [3]. Ambos os estudos serviram de validação para o estudo atual (resultados omitidos no presente trabalho). A solução se mostrou independente do refinamento de malha a partir de 20402, 94250 e 22334 volumes de controle para *AR* igual a 1, 4 e 24,

respectivamente. O código computacional ANSYS-CFX 14.5 foi utilizado para resolver as equações governantes do problema.

3. Resultados e Discussões

A Figura 1 mostra os diferentes padrões de escoamento que são gerados a partir de *AR* variando de 1 a 24 e *Re* variando de 16 a 1620, o escoamento se desenvolve da esquerda para direita. Para os Casos 1 e 4 com menores números de *Re*, verifica-se que uma única recirculação centralizada se desenvolve na geometria do tanque. Quando o *Re* aumenta essa recirculação principal torna-se assimétrica e se move para próxima da parede lateral direita do tanque. Esse efeito pode ser visto para os Casos 2 e 5. Para o Caso 2, com *AR* igual a 1 percebe-se a formação de uma recirculação menor, também próxima a parede lateral direita adicional a recirculação principal.

Para os casos com maiores Re nota-se que as recirculações principais tornam-se circulares. Pela presença da parede lateral direita na AR igual a 1 ser mais próxima a região de entrada do escoamento, quando comparada com a AR igual a 4, apenas uma estrutura principal é formada no Caso 3. Assim, para o Caso 3, nota-se que recirculações menores se formam no interior do tanque enquanto que para o Caso 6, uma recirculação maior próxima a parede lateral esquerda, também se desenvolve no escoamento. Dessa forma, quando altera-se a AR do tanque, verifica-se a formação de estruturas adicionais ao escoamento que surgem a partir de novas correntes de retorno ascendentes e descendentes dentro do tanque. Na análise dos casos 1 a 6, verifica-se que a estrutura que aparece próxima a parede lateral direita é similar para todos os casos, com mesmo Re, independente da AR. Esses resultados estão de acordo com a literatura [3].

Para o Caso 7, interessante por se tratar de um experimento [1], a AR é maior que para os demais casos (1 a 6), assim como a velocidade na superfície. Por outro lado, a altura do tanque é menor comparada aos demais casos, trazendo a esse escoamento um Re intermediário aos Casos 5 e 6. Ao analisar as linhas de

corrente, verifica-se uma similaridade entre o que foi apresentado nos casos 5 e 6. Essas recirculações nos tanques são esperadas devido a existência da parede direita oposta a região de entrada do vento sobre a superfície. Na presença de um limite sólido, a ação do vento à superfície induz correntes de retorno para baixo causando as recirculações e essas aumentam com o aumento do *Re*. Assim, o campo de velocidade dentro do tanque está significativamente relacionado com o gradiente de velocidade próximo a interface e a direção e intensidade da velocidade do vento escoando sobre a superfície líquida.

A Figura 2 foi gerada para a análise da transferência de massa em relação as dimensões do tanque. Para isso foram considerados os Casos 3 e 6, onde Re é igual a 1620. Fica evidente na Figura 2, que a distribuição do coeficiente local de transferência de massa, k, para o mesmo valor de Re e Sc, apresenta a mesma tendência para os casos estudados. O k_1 varia ao comprimento longo do do tanque, dimensão considerada na AR. O mesmo foi visto em outros estudos [3]. Ou seja, para regiões mais próximas a local de origem do parede lateral esquerda, escoamento do vento sobre a superfície, admite-se que o ar de entrada esteja sem concentração, e assim maior volatilização deve ocorrer nessa região quando comparada ao restante do tanque. Como consequência desse comportamento, o k, será menor para locais mais afastados da parede lateral esquerda e o valor de k, médio será maior para tanques com AR menor.



Figura 2 - Variação de *k*_l com o comprimento do tanque, L, para *Sc* igual a 557 e *Re* igual a1620.











Caso 3



Caso 4



Caso 5



Caso 7 (em corte para melhor visualização)

Figura 1- Estruturas que aparecem no escoamento para diferentes AR e *Re* analisados.

4. Conclusões

No presente trabalho, foi realizado uma simulação numérica de um tanque bidimensional com escoamento em regime laminar, para verificar as estruturas que se formam no escoamento, a partir de geometrias com diferentes razões de aspecto e submetidas a diferentes velocidades de interface induzida pela velocidade do vento na superfície.

As simulações se mostraram fortemente dependentes da velocidade na interface relacionada aos números de Reynolds investigados e da razão de aspecto do tanque. Quando o *Re* aumenta, estruturas mais complexas se desenvolvem no tanque e são mais significativas para *AR* maiores.

Observou-se também que, para Re e Sc constantes e variando AR, o valor de k_i médio será maior para tanques com razão de aspecto menor, uma vez que o parâmetro k_i decai com o comprimento do tanque.

5. Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES pelo apoio financeiro.

6. Referências

[1] FERONI, R. C. et al. Water Science and Technology, v. 66.9, p. 1991-1996, 2012.

[2] FERONI, R. C. Simulação numérica da transferência de massa de compostos odorantes através da interface de um sistema multifásico líquido-gás. 121f. Tese (Doutorado em Poluição Atmosférica), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Departamento de Engenharia Ambiental, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2015.

[3] CUESTA, I. et al. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 42, p. 165-179, 1999.

[4] LIMPT, H. et al. International Journal of Heat and Mass Transfer, v. 48, p. 4265–4281, 2005.

[5] LIU, S. et al. Physics of Fluids, v. 21, p. 062108-1 - 062108-19, 2009.