

Mestrado Integrado em Engenharia Química

***Modelação do foto-reator FluHelik usando
ferramentas de CFD***

Dissertação de Mestrado

de

Isabel Sofia Oliveira Barbosa

Desenvolvida no âmbito da unidade curricular de Dissertação

realizado em

***Laboratory of Separation and Reaction Engineering - Laboratory of Catalysis and
Materials (LSRE-LCM)***



Orientador: Doutora Raquel Cristóvão

Co-orientadores: Doutor Ricardo Santos

Doutor Vítor Vilar

Professor José Miguel Loureiro

Doutor Rui Boaventura



Departamento de Engenharia Química

Julho de 2018

***“Não tenhamos pressa,
mas não percamos tempo.”***
José Saramago

Agradecimentos

À Senhora Doutora Raquel Oliveira Cristóvão pela orientação, disponibilidade e colaboração permanente durante a realização da presente dissertação.

Ao Senhor Doutor Ricardo Santos pelos esclarecimentos fornecidos, incentivos transmitidos e pela cooperação na exploração de Ferramentas de Computação de Fluidos Dinâmicos.

Ao Senhor Doutor Vítor Vilar pela ajuda e acompanhamento.

Ao Senhor Professor Doutor José Miguel Loureiro e ao Senhor Professor Doutor Rui Boaventura pela colaboração.

Ao laboratório LSRE-LCM pela oportunidade de contribuir para o meu percurso académico e científico.

A todos os Senhores Professores que ministraram aulas ao longo do Curso Mestrado Integrado em Engenharia Química, dando-me a oportunidade de adquirir novos conhecimentos.

Ao Pedro Campos pelo auxílio na realização do desenho técnico.

Aos colegas e amigos do curso de Mestrado Integrado em Engenharia Química, destacando - Rafaela Gonçalves, Sofia Delgado e Joana Sousa - que contribuíram com muitos conselhos, apoio e amizade.

Ao meu Pai, José Carlos, à minha mãe, Isabel Maria, e aos meus irmãos, Mariana, Carolina e José, quero exprimir o meu agradecimento pelo constante suporte, amor, apoio incondicional, paciência e incentivo para concretizar os meus sonhos.

À memória do meu Avô Mino e à minha Avó Bina pelos ensinamentos e amor.

Ao Rafael Gonçalves, venho também expressar enorme gratidão pela motivação, encorajamento e companheirismo demonstrado em todos os momentos.

Este trabalho foi financiado por: Projeto POCI-01-0145-FEDER-006984 - Laboratório Associado LSRE-LCM - financiado pelo Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional (FEDER), através do COMPETE2020 - Programa Operacional Competitividade e Internacionalização (POCI) e por fundos nacionais através da Fundação para a Ciência e a Tecnologia I.P. A orientadora desta dissertação, Raquel O. Cristóvão, agradece à FCT pela sua bolsa de pós doutoramento (SFRH/BPD/101456/2014) e o co-orientador, Vítor J.P. Vilar, agradece o Programa de Investigador FCT 2013 (IF/00273/2013).

Resumo

Este estudo consistiu na investigação computacional e respetiva modelação de um novo foto-reator, designado FluHelik, à escala laboratorial, aplicado no tratamento de efluentes por processos UVC/H₂O₂ e UVC, comparando-o com um reator fotoquímico convencional de Jatos.

O foto-reator FluHelik consiste num reator tubular em que uma carcaça cilíndrica em aço inoxidável com entrada e saída tangencial contém no seu interior uma manga de quartzo concêntrica preenchida com uma lâmpada UVC.

O foto-reator de Jatos é um reator tubular de lâmpada única com entradas e saídas em forma de jatos, colocadas em paralelo com o escoamento de fluido. No caso em estudo, há 12 jatos de entrada e saída equidistantes, localizados nas extremidades do reator.

De modo a prever o comportamento dos dois foto-reatores, recorreu-se a simulações de Dinâmica Computacional de Fluidos (CFD), utilizando o código comercial CFD ANSYS Fluent ®. As simulações de CFD revelaram a geração de um movimento helicoidal de fluido em torno da lâmpada UVC no foto-reator FluHelik, induzindo propriedades dinâmicas e de irradiação únicas em comparação com o foto-reator de Jatos, como: (i) velocidades mais elevadas em quase todo o domínio do reator, mas com baixas velocidades perto da lâmpada UVC, promovendo alto contato entre o fluido e a radiação, (ii) maior intensidade de turbulência que aumenta o grau de mistura e (iii) maior tempo de residência das partículas do fluido dentro do reator. Além disso, os resultados obtidos experimentalmente são similares aos obtidos computacionalmente.

A simulação do foto-reator Jatos sugere um escoamento axial ao longo da secção tubular do reator, verificando-se um afastamento dos resultados obtidos experimentalmente.

Ademais, a configuração do foto-reator FluHelik favorece fortemente a implementação de vários reatores em série, promovendo a sua aplicação na indústria. Portanto, o reator FluHelik foi escolhido como o melhor foto-reator de canal anelar.

Palavras-chave: Projeto de reator; Reator Tubular; Reator FluHelik; Processos de Oxidação Avançados; Tratamento de água; Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD)

Abstract

This study consisted in the computational investigation and respective modeling of a new photo-reactor, called FluHelik, in laboratory scale, applied in the treatment of effluents by UVC / H_2O_2 and UVC processes, comparing it with a conventional photochemical reactor of Jets.

The FluHelik photo-reactor consists in a tubular reactor in which a stainless steel cylindrical housing with tangential inlet and outlet contains a concentric quartz sleeve with an UVC lamp.

The Jets photo-reactor is a single lamp tubular reactor with jets inlets and outlets located in parallel with the main direction of the fluid flow. In this case, the inlet is composed of 12 equidistant inlet and outlet jets located at the ends of the reactor.

Then, computational fluid dynamics (CFD) simulations were used to predict the behavior of both photo-reactors at laboratory scale. CFD simulations revealed the generation of a helical motion of fluid around the UVC lamp in the FluHelik photo-reactor, inducing unique fluid dynamics and irradiation properties in comparison with the jets photo-reactor, such as: (i) higher velocities in almost the entire domain of the reactor but with low velocities near the UVC lamp, promoting high contact between fluid and radiation, (ii) larger turbulence intensity which enhances mixing and (iii) longer residence time of fluid particles inside the reactor. In addition, the results obtained experimentally are similar to those obtained computationally.

The Jets photo-reactor simulation suggests an axial flow along the tubular section of the reactor, obtaining experimental results different from the computational ones.

In addition, the design of the FluHelik photo-reactor strongly favors the implementation of various reactors in series, promoting its application in industry. Therefore, the FluHelik reactor was chosen as the best annular channel photoreactor.

Keywords: Reactor design; Tubular Reactor; FluHelik reactor; Advanced Oxidation Processes; Water treatment; Computational Fluid Dynamics (CFD)

Declaração

Declaro, sob compromisso de honra, que este trabalho é original e que todas as contribuições não originais foram devidamente referenciadas com identificação da fonte.

Isabel Sofia Oliveira Barbosa

2 de Julho de 2018

Índice

1	Introdução.....	1
1.1	Enquadramento e Apresentação do Projeto	1
1.2	Objetivos	2
1.3	Organização da Tese	3
2	Contexto e Estado da Arte	4
2.1	Processos de Oxidação Avançados	4
2.1.1	UV.....	5
2.1.2	Fotólise de H_2O_2 (H_2O_2 /UV)	6
2.2	Desenho de Foto-reatores.....	8
2.2.1	Tipo e geometria dos reatores.....	8
2.2.2	Campo de radiação	10
2.3	Foto-Reatores.....	11
2.3.1	Foto-reator FluHelik.....	11
2.3.2	Foto-Reator de Jatos	13
2.4	CFD	13
2.4.1	Equação da continuidade	14
2.4.2	Equações de movimento linear	15
2.4.3	Derivação das equações de Navier-Stokes.....	16
2.4.4	Equação da energia	17
3	Materiais e Métodos	18
3.1	Sistema experimental	18
3.2	Modelo 3D dos Foto-Reatores em CFD	19
3.2.1	Desenho e Dimensões	19
3.2.2	Grelha computacional.....	21
3.3	Propriedades físicas dos materiais utilizados.....	23
3.4	Modelos físicos e condições-fronteira.....	23
3.4.1	Modelo Hidrodinâmico e de transferência de massa.....	24
3.4.2	Modelo de distribuição de radiação.....	26

3.4.3	CrITÉrios de convergência e Estratégia de solução.....	27
3.5	Comportamento hidrodinâmico	29
3.5.1	Caraterização da Distribuição dos tempos de residência	29
4	Resultados e Discussão.....	31
4.1	Simulação hidrodinâmica	31
4.1.1	Caracterização do campo de escoamento do Foto-Reator FluHelik.....	32
4.1.2	Caracterização do campo de escoamento do Foto-Reator Jatos	35
4.1.3	Caracterização da Distribuição dos Tempos de Residência.....	38
4.1.4	Comparação dos Resultados Experimentais e Computacionais da DTR.....	40
4.2	Simulação da Radiação	44
4.2.1	Lâmpada	44
4.2.2	Mapa de Temperatura	44
4.2.3	Distribuição da Radiação	45
4.3	Intensidade de Turbulência	46
5	Conclusões	48
Anexo 1	Desenho Técnico do Foto-Reator FluHelik	51

Lista de Figuras

<i>Figura 1. Espectro da radiação eletromagnética.</i>	<i>6</i>
<i>Figura 2. Configuração geométrica do Foto-Reator FluHelik.</i>	<i>12</i>
<i>Figura 3. Vista de seis reatores FluHelik em série.</i>	<i>12</i>
<i>Figura 4. Configuração geométrica do Foto-Reator Jatos.</i>	<i>13</i>
<i>Figura 5. Esquema da instalação experimental à escala laboratorial, incluindo o reator FluHelik (FF) e o reator Jatos (FJ).</i>	<i>18</i>
<i>Figura 6. Modelo 3D do FluHelik.</i>	<i>19</i>
<i>Figura 7. Modelo 3D do Foto-Reator Jatos.</i>	<i>20</i>
<i>Figura 8. Grelha computacional do Foto-Reator FluHelik (a) perspetiva isométrica, (b) detalhe da secção reta.</i>	<i>21</i>
<i>Figura 9. Grelha computacional do Foto-Reator Jatos (a) perspetiva isométrica; (b) detalhe da secção reta.</i>	<i>22</i>
<i>Figura 10. Pathlines, em termos de magnitude de velocidade, do escoamento laminar do foto-reator FluHelik, em estado estacionário.</i>	<i>32</i>
<i>Figura 11. Pathlines, em termos de magnitude de velocidade, do escoamento turbulento do foto-reator FluHelik, em estado estacionário.</i>	<i>32</i>
<i>Figura 12. Linhas de corrente no Foto-Reator FluHelik em escoamento laminar.</i>	<i>33</i>
<i>Figura 13. Linhas de corrente no Foto-Reator FluHelik em escoamento turbulento.</i>	<i>33</i>
<i>Figura 14. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator FluHelik, para o escoamento laminar, (a) perspetiva isométrica e (b) detalhe da secção reta.</i>	<i>34</i>
<i>Figura 15. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator FluHelik, para o escoamento turbulento, (a) perspetiva isométrica e (b) detalhe da secção reta.</i>	<i>34</i>
<i>Figura 16. Pathlines, em termo de magnitude de velocidade, do escoamento laminar do foto-reator Jatos, em estado estacionário.</i>	<i>35</i>
<i>Figura 17. Pathlines, em termo de magnitude de velocidade, do escoamento turbulento do foto-reator Jatos, em estado estacionário.</i>	<i>35</i>
<i>Figura 18. Linhas de corrente no Foto-Reator Jatos em escoamento laminar.</i>	<i>36</i>
<i>Figura 19. Linhas de corrente no Foto-Reator Jatos em escoamento turbulento.</i>	<i>36</i>
<i>Figura 20. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator Jatos para escoamento laminar.</i>	<i>37</i>
<i>Figura 21. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator Jatos para o escoamento turbulento.</i>	<i>37</i>

<i>Figura 22. Perfis da concentração de tracer à saída dos foto-reactores em função do tempo normalizado (θ).</i>	<i>38</i>
<i>Figura 23. Curva da DTR dos foto-reactores em função do tempo normalizado (θ).</i>	<i>39</i>
<i>Figura 24. Mapa da Distribuição de Temperaturas no interior do Foto-Reator FluHelik, segundo o plano XZ.</i>	<i>44</i>
<i>Figura 25. Mapa da Distribuição da Radiação no interior do Foto-Reator FluHelik, segundo o plano XZ.</i>	<i>45</i>
<i>Figura 26. Mapa da intensidade de turbulência no foto-reator FluHelik.</i>	<i>46</i>
<i>Figura 27. Mapa da intensidade de turbulência no foto-reator Jatos.</i>	<i>47</i>

Lista de Tabelas

<i>Tabela 1. POA's combinados com radiação UV ^{4,10}.</i>	5
<i>Tabela 2. Vantagens e desvantagens do processo H_2O_2/UVC ¹².</i>	7
<i>Tabela 3. Configuração de Foto-reatores tubulares de lâmpada única.</i>	9
<i>Tabela 4. Dimensões dos foto-reatores</i>	20
<i>Tabela 5. Características da Mesh do Foto-Reator FluHelik e do Foto-reator Jatos.</i>	22
<i>Tabela 6. Propriedades físicas da água e do fused-quartz.</i>	23
<i>Tabela 7. Condições-fronteira da simulação térmica 3D do FluHelik.</i>	24
<i>Tabela 8. Esquema de discretização das simulações dos reatores FluHelik e Jatos.</i>	27
<i>Tabela 9. Critérios de convergência para o valor máximo dos resíduos das simulações.</i>	28
<i>Tabela 10. Dados das simulações transientes.</i>	28
<i>Tabela 11. Dados e Resultados da simulação.</i>	31
<i>Tabela 12. Evolução da experiência de injeção de tracer ao longo do tempo, em regime laminar no Foto-Reator FluHelik.</i>	40
<i>Tabela 13. Evolução da experiência de injeção de tracer ao longo do tempo, em regime laminar no Foto-Reator Jatos.</i>	41
<i>Tabela 14. Parâmetros da DTR do modelo computacional e experimental.</i>	42
<i>Tabela 15. Dados da simulação turbulenta.</i>	46

Notação e Glossário

$\vec{a}$	Vetor Aceleração	m s^{-2}
A_{inlet}	Área de Entrada	m^2
C	Concentrações	kg m^{-3}
C_p	Capacidade Calorífica	$\text{J kg}^{-1} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$
D_h	Diâmetro Hidráulico	mm
D_m	Difusividade Molecular	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$
E	Energia	J
$E_{l,v}$	Taxa Volumétrica Local de Absorção de Energia	W
$\vec{F}$	Vetor Força	N
f	Componente Escalar do Vetor Força	
$\vec{g}$	Vetor Aceleração Gravítica	m s^{-2}
G_v	Intensidade de Radiação Incidente	W
I	Intensidade da Radiação Espectral	W m^{-2}
I_t	Intensidade de Turbulência	
$\hat{i}$	Vetor Unitário na Direção x	
J_i	Fluxo Difusivo da Espécie i	$\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$
$\hat{j}$	Vetor Unitário na Direção y	
k	Condutividade Térmica	$\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$
$\hat{k}$	Vetor Unitário na Direção z	
L	Comprimento	m
m	Massa	kg
m_i	Fração Mássica da Espécie i	
N	Número Total de Espécies	
P	Potência	W
p	Pressão	Pa
q	Fluxo de Energia	W
$\dot{Q}$	Taxa de Adição de Calor	W
r	Raio	m
$\vec{r}$	Vetor Posição	m
Re	Número de Reynolds	
s	Comprimento do Percurso	m
$\vec{s}$	Vetor Direção	
$\vec{s}^i$	Vetor Direção de Dispersão	
t	Tempo	s
T	Temperatura	K
$\bar{t}_r$	Tempo Médio de Residência	s
u	Componente Escalar do Vetor Velocidade na Direção x	
u_{inlet}	Velocidade de Entrada	m s^{-1}
$\vec{v}$	Vetor Velocidade	m s^{-1}
v	Componente Escalar do Vetor Velocidade na direção y	
w	Componente Escalar do Vetor Velocidade na direção z	
$\dot{W}$	Taxa de Trabalho Realizado	W

Letras gregas

α	Coeficiente de Absorção	m^{-1}
n	Índice de Refração	
σ_s	Coeficiente de Dispersão	m^{-1}
Ω'	Ângulo Sólido	
σ	Constante de Stefan-Boltzmann	$5.669 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$
Φ	Função Fase	
ε	Taxa de Dissipação de Turbulência	$\text{m}^2 \text{ s}^{-3}$
τ	Tempo de Passagem	s
μ	Viscosidade Molecular	$\text{Pa} \cdot \text{s}$
$\bar{\tau}$	Tensores	
ρ	Massa Volúmica	kg m^{-3}
k	Energia Cinética Turbulenta	$\text{m}^2 \text{ s}^{-2}$
θ	Tempo Adimensional	

Lista de Siglas

CFD	Computação de Fluidos Dinâmicos (<i>Computational Fluid Dynamics</i>)
DNA	Ácido Desoxirribonucleico
DOM	<i>Discrete Ordinate Method</i>
DTR	Distribuição dos Tempos de Residência
FEF	Foto-Eletro-Fenton
IR	Infravermelho (<i>Infra-Red</i>)
LSRE-	<i>Laboratory of Separation and Reaction Engineering - Laboratory of Catalysis and</i>
LCM	<i>Materials</i>
LVREA	Taxa Volumétrica Local de Absorção de Energia (<i>Local Volumetric Rate of Energy Absorption</i>)
AO	Oxidação Aniónica
POA's	Processos de Oxidação Avançados
RANS	Equações de Navier-Stokes de Reynolds Médio (<i>Reynolds Average Navier-Stokes</i>)
RTE	Equação de Transporte de Radiação (<i>Radiation Transport Equation</i>)
UV	Ultravioleta
UVA	Radiação Ultravioleta A
UVB	Radiação Ultravioleta B
UVC	Radiação Ultravioleta C
Vis	Visível

1 Introdução

1.1 Enquadramento e Apresentação do Projeto

A presença de novos contaminantes e o aumento das concentrações de contaminantes no meio aquático podem constituir uma séria ameaça à qualidade da água ¹. Devido às regulamentações ambientais cada vez mais rigorosas, e às preocupações em relação aos métodos de tratamento químico, surgem métodos alternativos de tratamento de água².

Na última década, tem-se assistido a um rápido desenvolvimento das tecnologias de tratamento fotoquímico². Na Europa, mais de 3000 estações de tratamento de água potável usam a tecnologia de desinfecção por UV ³. O uso da radiação UV para desinfecção das águas inativa os microrganismos através de alterações no DNA dos agentes patogénicos, tornando-os incapazes de se reproduzir ².

Entre estas tecnologias baseadas na utilização de radiação UV, encontram-se os Processos de Oxidação Avançados (POA's), bastante promissores, uma vez que têm elevada eficiência no tratamento de efluentes com poluentes fortemente persistentes e refratários a outros tratamentos de remediação/descontaminação ambiental ⁴. A aplicação de UV em POA's envolve a excitação de um catalisador ou a quebra da molécula de um oxidante, tal como o H_2O_2 , podendo ser combinado com o O_3 , para gerar radicais hidroxilo altamente reativos para oxidar substratos orgânicos (tóxicos)⁵. Os tratamentos oxidativos baseados em tecnologias fotoquímicas requerem o uso de energia radiante com comprimentos de onda que geram quantidades desprezáveis de calor, sendo efetuados à temperatura ambiente. Estes apresentam como vantagens operacionais ³: (i) melhores condições de equilíbrio para reações exotérmicas; (ii) condições mais favoráveis para operação na fase aquosa; e (iii) minimização de produtos secundários quando o processo é bem dimensionado.

A aplicação industrial dos POA's na fotodegradação de compostos orgânicos, em grande escala, encontra-se em desenvolvimento, existindo a possibilidade de os combinar com métodos tradicionais. Na indústria têxtil, por exemplo, pode recorrer-se ao processo UV/ H_2O_2 para a remoção de corantes organoclorados, de modo a reduzir a toxicidade do efluente e remover a sua cor, seguido por um tratamento biológico convencional. Outras aplicações promissoras para os POA's são a oxidação de cianetos de processos de galvanoplastia, a degradação de explosivos tóxicos e a degradação de micro-contaminantes em águas residuais urbanas com o objetivo de reutilização da água para irrigação ³.

O processo UV/ H_2O_2 é um POA de elevado potencial pela facilidade de operação e eficácia na remediação de efluentes. Contudo, a eficácia dos sistemas UV é amplamente determinada pelos

processos hidrodinâmicos que ocorrem no sistema, influenciando a distribuição espacial dos microrganismos ou substratos tóxicos ^{2,5}.

Num foto-reator, o comportamento hidrodinâmico define a distribuição da concentração espacial e o fluxo dos reagentes químicos e contaminantes no interior do reator. A(s) lâmpada(s) fornecem a radiação que conduz à reação principal, com a taxa de fluência de UV atenuada pela distância da lâmpada e transmitância do meio ². A velocidade de reação é determinada pela taxa local de fluência de UV, concentração das espécies e constantes cinéticas ².

A modelação de foto-reatores envolve, portanto, três submodelos para hidrodinâmica, distribuição da taxa de fluência de radiação e cinética de reação, que são acoplados pelos balanços de energia e material ².

O uso de ferramentas avançadas de simulação numérica, em particular a Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), para modelar o fluxo e o transporte em processos de engenharia química tem atraído muita atenção nos últimos anos. Para simular o desempenho dos foto-reatores considerados neste estudo, foram também usados modelos CFD integrados. Uma das principais vantagens de simular o desempenho do reator resolvendo as equações governantes do sistema é a capacidade de prototipagem virtual, permitindo o corte de custos reduzindo os tempos de ciclo de projeto e avaliando mais alternativas de projeto ².

1.2 Objetivos

A presente dissertação foca-se na simulação computacional de um foto-reator inovador, designado FluHelik, aplicado na descontaminação de águas, nomeadamente por processos de UVC/H₂O₂ e UVC. O foto-reator FluHelik foi projetado no LSRE-LCM e apresenta vantagens face a um reator de jatos convencional. A geometria do foto-reator FluHelik promove um padrão de escoamento helicoidal, favorecendo a irradiação do fluido, tornando-a mais uniforme e permite maximizar a turbulência do fluido, promovendo a sua mistura e o contacto com a radiação.

Inicialmente, construiu-se o modelo geométrico tridimensional dos foto-reatores, dimensionados à escala laboratorial. Através da aplicação da Computação de Fluidos Dinâmicos (CFD), utilizada como ferramenta de simulação da degradação de OTC (oxitetraciclina) num reator fotoquímico: (i) caracterizou-se a hidrodinâmica do reator; (ii) determinou-se a distribuição dos tempos de residência (DTR) do reator, comparando-a com os resultados experimentais obtidos; (iii) caracterizou-se a distribuição de radiação; (iv) comparou-se as diferentes configurações; e (v) avaliou-se o desempenho dos foto-reatores, em estudo.

Em geral, o presente trabalho relata um procedimento para a modelação global de reatores fotoquímicos considerando dois fenómenos envolvidos no processo: mecânica dos fluidos e transferência de radiação.

1.3 Organização da Tese

A dissertação apresentada tem 5 capítulos, incluindo o presente capítulo introdutório, Contexto e Estado da Arte, Materiais e Métodos, Resultados e Discussão e, por fim, Conclusão.

No primeiro capítulo, apresenta-se a problemática dos contaminantes nas águas, a importância da utilização de novas tecnologias para o tratamento de águas residuais e o interesse da implementação de ferramentas computacionais como meio de modelação de reatores intervenientes na remediação destas águas. Posteriormente, são expostos os objetivos e a estrutura desta dissertação.

O segundo capítulo, Contexto e Estado da Arte, aborda os processos fotoquímicos e a modelação dos reatores utilizados nessa aplicação. Primeiramente, introduz-se os Processos de Oxidação Avançados, destacando-se os processos UVC e UVC/H₂O₂. Em seguida, são descritas as geometrias de reatores fotoquímicos, particularmente dos foto-reatores FluHelik e de Jatós. Por fim, apresenta-se a aplicação de CFD no tratamento matemático dos reatores.

O terceiro capítulo, Materiais e Métodos, descreve o sistema experimental analisado e as simulações propostas. Neste capítulo, registam-se o modelo de construção da grelha computacional, as propriedades dos materiais utilizados, os modelos físicos e condições-fronteira, bem como, os critérios de convergência e estratégia de solução nas simulações. Posteriormente, é descrito o método de análise do comportamento hidrodinâmico através da Distribuição de Tempos de Residência.

No quarto capítulo apresentam-se os resultados e a discussão das simulações. Em primeiro lugar, apresenta-se o padrão de escoamento para as simulações realizadas. Seguidamente, mostra-se os resultados obtidos para as DTR dos foto-reatores testados, comparando-se com os resultados experimentais, previamente obtidos, e, finalmente, avalia-se o desempenho dos foto-reatores FluHelik e de Jatós no tratamento de águas contaminadas.

O quinto capítulo encerra a presente dissertação mostrando, sucintamente, as principais conclusões do estudo.

2 Contexto e Estado da Arte

A revolução industrial (século XVIII) marcou o início de grandes evoluções nos processos industriais. Tais processos tornaram-se essenciais para a sociedade moderna, atendendo ao crescimento demográfico. No sentido de satisfazer as necessidades básicas da população, desenvolveram-se inúmeras técnicas de processamento das matérias-primas, alterando muito rapidamente a forma de exploração dos recursos naturais e intensificando a exploração do meio ambiente ⁴.

A evolução industrial ficou associada a diversos problemas ambientais, nomeadamente a descarga de águas contaminadas com poluentes orgânicos e as indústrias ficaram obrigadas a intervir no tratamento dos efluentes ⁴.

Atualmente, existe uma crescente preocupação em minimizar o impacto das descargas de águas residuais para o meio ambiente. Durante décadas, para a descontaminação das águas residuais, recorreu-se a tratamentos físico-químicos e biológicos, tendo estes alcançado a maturidade. Face às limitações destes tratamentos convencionais relativamente aos limites fixados por regulamentação ambiental surgiram novas tecnologias que apresentam maior eficiência no tratamento de efluentes, nomeadamente os processos de oxidação avançados (POA's) ⁶.

Na última década, foram desenvolvidas ferramentas computacionais que permitem descrever o sistema hidráulico e de radiação dos processos de tratamento de água. A Computação de Fluidos Dinâmicos (CFD) é uma ferramenta que utiliza modelos numéricos avançados para modelar escoamento, reação e mistura em diversos sistemas. O uso dos modelos CFD ajuda a prever propriedades específicas desses sistemas, sendo uma ferramenta muito útil, por exemplo, para o *design* de instalações de tratamento de água ⁷.

2.1 Processos de Oxidação Avançados

Os Processos de Oxidação Avançados (POA's) desempenham um papel importante na degradação de poluentes orgânicos em tratamentos de remediação de águas contaminadas, sendo bastantes promissores devido à sua elevada eficiência ⁴.

Estes processos são caracterizados pela produção de radicais livres, nomeadamente radicais hidroxilo altamente oxidativos ($\text{HO}\cdot$), gerados em reações fotocatalisadas ou quimicamente catalisadas, capazes de mineralizar compostos orgânicos recalcitrantes e não biodegradáveis a formas não tóxicas, como dióxido de carbono (CO_2) e água (H_2O) ^{4,8-10}. Contrariamente ao que acontece nos processos de tratamento físicos e químicos convencionais, nos POA's não ocorre transferência de fase dos poluentes, estes últimos são completamente destruídos, sem produzir resíduos secundários ^{6,8}.

Os radicais hidroxilo são, geralmente, formados através de reações que resultam da combinação de oxidantes, como o ozono (O_3) e o peróxido de hidrogénio (H_2O_2), com radiação ultravioleta (UV) ou visível (Vis) e catalisadores, tais como iões metálicos ou semicondutores ⁴. Na presença de radicais $HO^\cdot$, as velocidades de degradação dos compostos orgânicos são elevadas, podendo ser obtidas taxas de reação de 1 milhão a 1 bilião de vezes superiores às obtidas com oxidantes químicos, como o H_2O_2 e o O_3 . O desempenho dos POA's aumenta com o aumento da produção os radicais hidroxilo ¹¹.

Os POA's podem ser combinados com a presença de radiação UV. Os processos fotoquímicos ou homogêneos consistem na combinação de oxidantes químicos com a radiação UV, já os processos fotocatalíticos contam com a presença de catalisadores sólidos, sendo também denominados por processos heterogêneos ^{6,10}.

Na Tabela 1, são apresentados os principais sistemas homogêneos e heterogêneos combinados com radiação UV.

Tabela 1. POA's combinados com radiação UV ^{4,10}.

POA's	TiO ₂ /UVA
Heterogêneos	TiO ₂ /H ₂ O ₂ /UVA
POA's Homogêneos	UVC
	O ₃ /UVC
	H ₂ O ₂ /UVC
	O ₃ / H ₂ O ₂ /UVC
	OA- H ₂ O ₂ /UVC - Oxidação anódica com eletrogeração de H ₂ O ₂
	Fe ²⁺ /H ₂ O ₂ /UVC - Foto-Fenton
	FEF - Foto-Eletro-Fenton

Seguidamente, os processos homogêneos UVC e H₂O₂/UVC utilizados na simulação computacional do foto-reator FluHelik serão descritos detalhadamente.

2.1.1 UV

A radiação UV é uma forma de energia designada por radiação eletromagnética com comprimentos de onda entre 100 e 400 nanómetros (nm) e de frequência maior que a luz visível ¹².

A radiação ultravioleta pode ser classificada em três tipos: UVA, UVB e UVC. A radiação UVA tem um comprimento de onda de 320 a 400 nm, a radiação UVB tem um comprimento de onda

de 280 a 320 nm e a radiação UVC tem um comprimento de onda de 100 a 280 nm, tal como é apresentado no espectro presente na Figura 1.

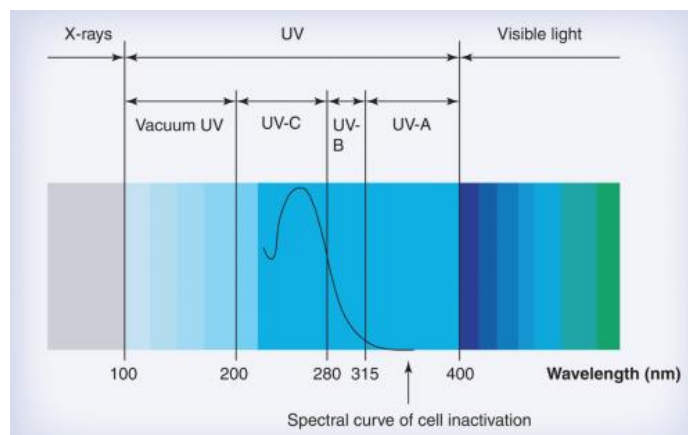


Figura 1. Espectro da radiação eletromagnética¹⁴.

A desinfecção ultravioleta (UV) é um meio eficaz no tratamento da água ¹⁴. Este processo consiste na utilização da radiação UVC (em comprimentos de onda de 200 a 280 nm) para inativar microrganismos, impedindo assim a sua reprodução. Contrariamente a tecnologias convencionais, esta tecnologia não introduz ou gera quaisquer materiais químicos ou subprodutos perigosos ¹³.

A eficácia deste método depende das características das lâmpadas UV e também de propriedades do meio, tais como a turbidez da água (transmissibilidade da luz), da concentração dos poluentes e do tipo de água residual ¹².

No sentido de aumentar a eficiência da degradação dos compostos orgânicos, a radiação UV é combinada com oxidantes químicos, ocorrendo a fotólise destes oxidantes e a geração de radicais muito reativos.

2.1.2 Fotólise de H₂O₂ (H₂O₂/UV)

O sistema H₂O₂/UV é uma tecnologia que permite a degradação de poluentes orgânicos presentes em efluentes industriais, de forma a não produzir resíduos ⁴.

O peróxido de hidrogénio pode sofrer fotólise pela absorção de radiação UV em comprimentos de onda de 200 a 280 nm, originando a cisão homolítica da ligação O – O da molécula de H₂O₂, levando, desta forma, à formação de radicais HO[•] (2.1). Estes radicais podem também contribuir para a decomposição de H₂O₂ através de reações secundárias (2.2), formando espécies menos reativas ¹².

Nestas condições, ocorrem várias reações sucessivas e competitivas, representadas pelas equações 1 a 7 ¹².



Contudo, a molécula de H_2O_2 pode também agir como sequestrador de radicais $\text{HO}\cdot$, comprometendo assim a eficácia do sistema ⁴. Desta forma, o estudo da concentração ótima de oxidante a usar em cada sistema é de extrema importância.

É importante referir que a taxa de produção de radicais livres depende também de parâmetros associados às características das lâmpadas UV (espectro de emissão, potência) e das propriedades físico-químicas do meio (pH, transmissibilidade do meio reacional, turbidez,...) ¹².

A Tabela 2. apresenta as vantagens e desvantagens da utilização do processo $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UVC}$.

Tabela 2. Vantagens e desvantagens do processo $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UVC}$ ¹².

Vantagens	Desvantagens
- Solubilidade do H_2O_2 em água - Geração de duas moles de radicais $\text{HO}\cdot$ por mole de moléculas de H_2O_2 - Estabilidade térmica - Procedimentos de operações simples - Inexistência de problemas de transferência de massa	- Custo do processo H_2O_2 funciona como sequestrador de radicais hidroxilo - Taxa de oxidação química do poluente limitada pela taxa de formação dos radicais hidroxilo

A potencialidade do uso destes processos para o tratamento de efluentes deve-se principalmente à sua simplicidade, uma vez que a reação ocorre à temperatura e pressão ambiente e se aplica a uma grande variedade de compostos ⁴.

2.2 Desenho de Foto-reatores

Os foto-reatores apresentam vantagem sobre os reatores convencionais de termo-excitação, pela seletividade e as baixas temperaturas de operação que apresentam. Apesar destas vantagens, os foto-reatores não são comumente usados na indústria devido ao custo associado ao processo ⁸. O processo fotoquímico só é utilizado quando não existem processos convencionais (térmicos ou catalíticos) viáveis disponíveis. Neste sentido, as aplicações deste tipo de reatores à escala industrial são restritas devido a limitações de tamanho, dificuldades de projeto e construção e baixo tempo de vida útil das lâmpadas ⁸.

O projeto de sistemas de tratamento UV requer conhecimento sobre a configuração do sistema (*design* do reator, tubulações, quantidade de lâmpadas e sua orientação) e sobre a sua cinética química (mecanismos de reação e constantes cinéticas) ³. A seleção e o desenho de foto-reatores estão intrinsecamente associados à natureza dos reagentes, ao rendimento e à qualidade dos produtos desejados ^{9,15}.

Neste sentido, a montagem de uma instalação de fluxo fotoquímico envolve uma análise detalhada da geometria do reator e do campo de radiação ^{9,15}.

O desenho de um reator fotoquímico requer ainda a solução de equações de momento, energia e balanço mássico, indicadas no subcapítulo CFD.

2.2.1 Tipo e geometria dos reatores

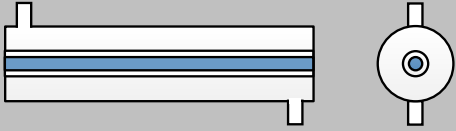
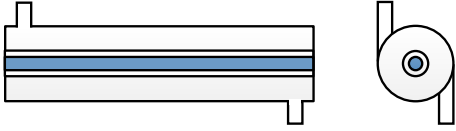
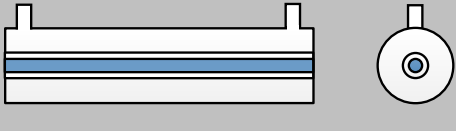
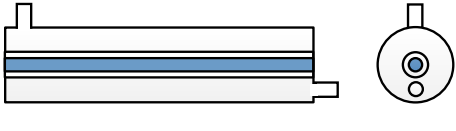
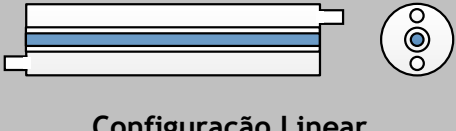
O desempenho do reator é crucialmente dependente da sua geometria, uma vez que o transporte de fótons desde a fonte de luz até ao meio de reação deve ser maximizado. A não homogeneidade da irradiação pode causar variações locais importantes nas condições de reação, reduzindo o rendimento e a seletividade ¹⁵.

As três configurações geométricas padrão mais utilizadas são as seguintes: tubular, elíptica e parabólica ⁹. Neste trabalho, foi analisado o reator do tipo tubular de lâmpada única.

A configuração tubular é a configuração mais simples e eficiente para obter elevados rendimentos numa operação contínua. No foto-reator tubular, a lâmpada é colocada no centro de um tubo de forma cilíndrica. Uma das desvantagens associada a esta geometria é a não uniformidade na distribuição/receção da luz: pontos próximos da superfície interna são bem iluminados, recebendo uma maior intensidade de luz; pontos distantes da superfície interna, estão fracamente iluminados, recebendo pouca ou nenhuma luz devido ao aumento da espessura ótica (Lei de Lambert-Beer) ⁹.

Os foto-reatores tubulares são classificados de acordo com a disposição da entrada e saída do fluido, como mostrado na Tabela 3 ¹⁶.

Tabela 3. Configuração de Foto-reatores tubulares de lâmpada única.

Foto-reator	Descrição
 Configuração S-centrada	Tubos de entrada e saída localizados perpendicularmente ao escoamento de fluido no centro do tubo do reator no plano vertical com entrada no topo e saída na parte inferior ¹⁷.
 Configuração S-tangencial	Tubos de entrada e saída localizados perpendicularmente ao escoamento do fluido e tangencialmente ao tubo do reator no plano vertical com entrada no topo e saída na parte inferior em lados opostos ¹⁷.
 Configuração U	Tubos de entrada e saída localizados perpendicularmente ao escoamento de fluido no centro do tubo do reator no plano vertical e no topo ¹⁷.
 Configuração L	Tubo de entrada localizado perpendicularmente ao escoamento de fluido no plano vertical e no topo, e tubo de saída colocado em paralelo com o escoamento de fluido ¹⁶.
 Configuração Linear	Tubos de entrada e saída colocados em paralelo com o escoamento de fluido nas extremidades ¹⁶.
 Configuração L-invertida	Tubo de entrada colocado em paralelo com o escoamento de fluido na extremidade, e tubo de saída localizado perpendicularmente ao escoamento de fluido no centro do tubo do reator no plano vertical e no topo ¹⁶.

		Tubos de entrada e saída localizados perpendicularmente ao escoamento do fluido e tangencialmente ao tubo do reator no plano horizontal com entrada na parte inferior e saída na parte superior no mesmo lado ¹⁸.
		Tubos de entrada e saída localizados perpendicularmente ao escoamento do fluido e tangencialmente ao tubo do reator no plano horizontal e no topo em lados opostos.
		Quatro entradas e quatro saídas colocadas em paralelo com o escoamento de fluido nas extremidades do tubo do reator.

Wright e Hargreaves demonstraram que o arranjo da entrada e saída de fluido afeta o desempenho do reator e avaliaram também a influência da distância dos tubos de entrada/saída das paredes superior/inferior do reator ^{17,19}.

2.2.2 Campo de radiação

A utilização de radiação é o fator mais importante que diferencia o reator fotoquímico dos processos reativos convencionais ativados termicamente ⁹.

O desempenho e a cinética do foto-reator são também determinados pelo campo de radiação. A taxa de reação fotoquímica é proporcional à taxa volumétrica local de absorção de energia (*Local volumetric rate of energy absorption*, LVREA), um parâmetro crucial no *design* de um foto-reator. LVREA é uma função complexa da intensidade da lâmpada, da concentração de espécies absorventes, das características geométricas do sistema foto-reator e de algumas outras propriedades físico-químicas ⁸.

A caracterização do campo de radiação de um reator fotoquímico envolve a incorporação de fenómenos óticos (reflexão, refração e zonas de sombra) e de características da lâmpada, incluindo também a configuração específica do reator. A distribuição de energia radiante em foto-reactores é descrita pela equação de transporte de radiação (*Radiation Transport Equation*, RTE). Para um dado comprimento de onda, a intensidade de radiação espectral (I) para um meio de absorção, emissão e dispersão na posição $\vec{r}$ numa direção $\vec{s}$ é definida pela equação seguinte ³:

$$\frac{dI(\vec{r},\vec{s})}{ds} + (\alpha + \sigma_s)I(\vec{r},\vec{s}) = \alpha n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r},\vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (2.8)$$

Em que $\vec{s}'$ corresponde ao vetor direção de dispersão, s ao comprimento do percurso, α ao coeficiente de absorção, n ao índice de refração, σ_s ao coeficiente de dispersão, Ω' ao ângulo sólido, σ à constante de Stefan-Boltzmann ($5.669 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$), T é a temperatura local e Φ é a função fase ²⁰.

O termo $\alpha I(\vec{r}, \vec{s})$ representa a perda de energia devido à absorção, o termo $\sigma_s I(\vec{r}, \vec{s})$ a perda devido à dispersão e o termo $\frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega'$ o ganho de energia devido à emissão, sendo desprezável para sistemas operados à temperatura ambiente. $\Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}')$ representa a função fase, cujo valor é 1 para dispersão isotrópica ^{3,9}.

A intensidade incidente em qualquer ponto em todas as direções é dada por:

$$G_v = \int_{\Omega=0}^{\Omega=4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}) d\Omega' \quad (2.9)$$

Deste modo, LVREA é representada pela equação seguinte.

$$E_{l,v}(s) = \alpha G_v(s) \quad (2.10)$$

A taxa volumétrica local de absorção de energia (LVREA), isto é, a intensidade absorvida, é o produto da intensidade espectral específica e do coeficiente de absorção. Por sua vez, a velocidade de uma reação fotoquímica é o produto da LVREA pelo rendimento quântico, sendo que este último indica o número de moles de produtos químicos que reagiram por moles de fótons absorvidos ⁸.

Em síntese, o desempenho dos reatores UV depende também da dinâmica do fluido. A geometria do reator e a interação entre o fluido e a radiação emitida pelas lâmpadas UV geram escoamentos complexos com zonas de recirculação, separação e vórtices. O escoamento do fluido influencia a distribuição dos reagentes e da intensidade de radiação por todo o reator, afetando a sua absorção pelas espécies. Como consequência, as velocidades de reação são acopladas ao equilíbrio do momento, tornando a Computação de Fluidos Dinâmicos (CFD) uma ferramenta de análise e *design* adequada para um equipamento UV ¹⁸.

2.3 Foto-Reatores

2.3.1 Foto-reator FluHelik

FluHelik consiste num reator tubular de forma cilíndrica com entrada e saída tangenciais, com apenas uma lâmpada, concêntrica com a manga de quartzo e a carcaça do reator, aplicado no tratamento de soluções aquosas por processos UVC/H₂O₂ e UVC, por exemplo. É um foto-reator inovador de elevada eficiência com iluminação artificial, para tratamento de efluentes.

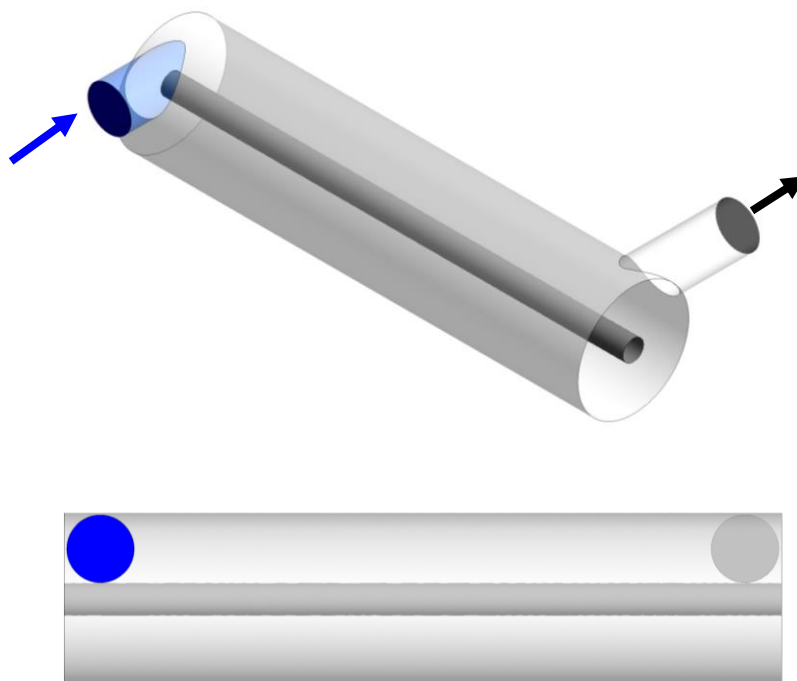


Figura 2. Configuração geométrica do Foto-Reator FluHelik.

A sua configuração da alimentação promove um movimento helicoidal do fluido em torno da fonte de radiação, permitindo um maior tempo de contacto entre os contaminantes e os reagentes com os fotões UVC e maximiza a turbulência e mistura do fluido.

A configuração do FluHelik favorece, ainda, a implementação de vários reatores em série, o que torna esta configuração vantajosa do ponto de vista construtivo, tal como se mostra na Figura 3.

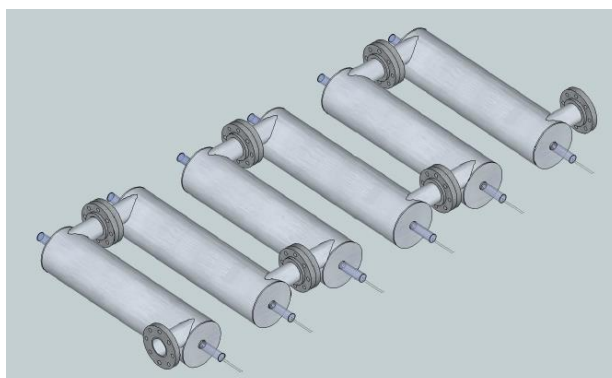


Figura 3. Vista de seis reatores FluHelik em série.

O foto-reator é constituído por uma carcaça cilíndrica de aço inoxidável polido com tubos de entrada e saída localizados perpendicularmente à direção principal do escoamento do fluido e tangencialmente ao invólucro no plano horizontal e na parte superior em lados opostos e por um tubo de quartzo interno concêntrico, onde é colocada uma lâmpada UVC.

2.3.2 Foto-Reator de Jatos

O Foto-Reator de Jatos é um reator tubular constituído por um tubo de borossilicato com entradas localizadas nas extremidades do tubo e um tubo de quartzo concêntrico, aplicado no tratamento de soluções aquosas por processos UVC/H₂O₂ e UVC, por exemplo, tal como o foto-reator FluHelik.

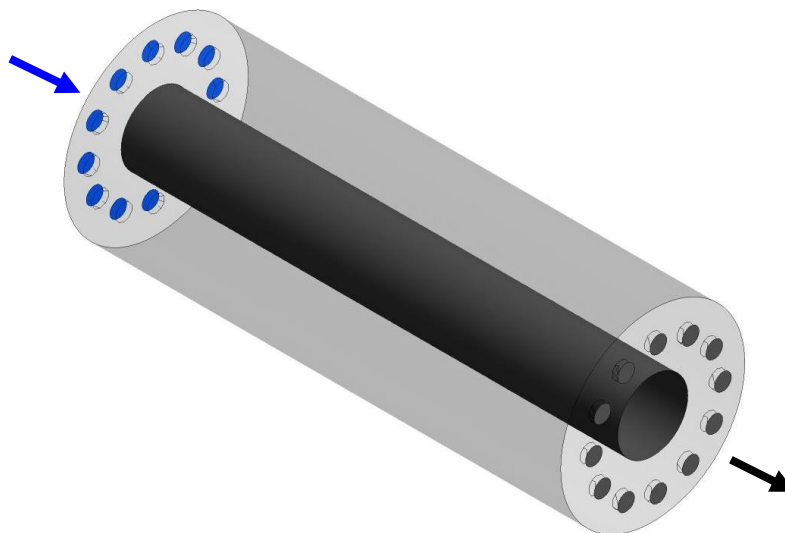


Figura 4. Configuração geométrica do Foto-Reator Jatos.

No caso em estudo, este foto-reator apresenta doze entradas e doze saídas equidistantes colocadas em paralelo com o fluxo de fluido nas extremidades do tubo do reator.

2.4 CFD

A análise de sistemas fotoquímicos estava limitada pela falta de ferramentas numéricas robustas que resolvessem o acoplamento e a complexidade das equações de quantidade de movimento, de massa e de energia com a adição do balanço de radiação (Balanço fotónico). Desde 2000, devido à evolução da capacidade de processamento dos computadores e elaboração de métodos numéricos para determinação da distribuição de energia radiante em sistemas fotoquímicos, CFD surgiu como ferramenta para contornar essas dificuldades. Apresenta como vantagem o reconhecimento da tridimensionalidade dos balanços de quantidade de movimento, de massa e de radiação e a possibilidade de avaliar a influência da geometria do reator e dos seus parâmetros operacionais sobre o processo oxidativo apenas com protótipos virtuais ³.

O projeto de um reator fotoquímico requer a solução das equações de dinâmica, energia e balanços de massa. A expressão para a conservação do momento é semelhante à do reator convencional. Assume-se que a radiação não afeta o fluxo de fluido fotoquimicamente reativo. As equações de equilíbrio de massa ou de continuidade para cada composto no sistema são resolvidas simultaneamente para encontrar o perfil de concentração de cada composto dentro do foto-reator, através de CFD ⁸.

Seguidamente, serão apresentadas as equações básicas para os campos de escoamento de fluídos newtonianos, considerando que o fluido aplicado na simulação é contínuo e isotrópico, respeitando a lei de Fourier da condução de calor ²¹.

O movimento tridimensional do fluido é descrito por um campo de velocidades, dado pelo vetor velocidade $\vec{v} = u\hat{i} + v\hat{j} + w\hat{k}$, com as três componentes u , v , w num plano cartesiano, dependendo também da pressão e da temperatura ²¹.

Neste sentido, para determinar estas cinco variáveis existem cinco equações: (i) a equação da continuidade (conservação de massa), (ii) três equações de conservação do momento e (iii) a equação de energia ou conservação de energia. As equações de conservação são obtidas pelas leis do movimento de Newton e pela primeira e segunda leis da termodinâmica, combinadas através do teorema de transporte de Reynolds para um volume de controlo finito, fixo e imutável. Estas equações de conservação contêm elementos que expressam propriedades físicas dependentes da temperatura e da pressão, tais como a densidade $\rho(T,p)$, a capacidade calorífica a pressão constante $C_p(T,p)$, a viscosidade $\mu(T,p)$ e a condutividade térmica $k(T,p)$ ^{21,22}. Em suma, as equações de CFD correspondem aos princípios físicos da conservação.

2.4.1 Equação da continuidade

A equação da continuidade ou equação de conservação da massa assenta no princípio de que a massa de um “corpo de fluido” se mantém contante, então a soma da massa que entra ou sai de um volume de controlo, por unidade de tempo, é igual à alteração da massa devido à mudança de densidade por unidade de tempo. De forma geral, a equação da continuidade é expressa pela equação 11 ²¹⁻²³.

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0 \quad (2.11)$$

Onde $\frac{D\rho}{Dt}$ é a derivada da densidade em relação ao tempo que se determina através da equação 12.

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \vec{v} \quad (2.12)$$

Sendo composta pela derivada local $\frac{\partial \rho}{\partial t}$, quando o escoamento não está em regime permanente e pelo termo convectivo $\rho \nabla \cdot \vec{v}$.

Assim, combinando as equações anteriores obtém-se a equação 13.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.13)$$

Para pressões em que o fluido possa ser considerado como incompressível a derivada da densidade em relação ao tempo é nula ($\frac{\partial \rho}{\partial t}=0$), uma vez que a densidade não será função do tempo. Então para escoamentos incompressíveis, a equação da continuidade reduz-se à equação 14.

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (2.14)$$

Nos casos onde existe estratificação de densidade, mesmo estando o fluido dentro de condições em que possa ser considerado incompressível, a densidade do fluido é variável, mas cada partícula de fluido mantém a sua densidade. A densidade constante no escoamento inteiro é uma condição suficiente para o escoamento incompressível ²¹⁻²³.

2.4.2 Equações de movimento linear

Estas equações são obtidas através da segunda lei de Newton, que enuncia que a soma vetorial das forças num corpo é igual à taxa de alteração de movimento linear do corpo, tal como é representado pela equação 15 ²².

$$\vec{F} = \frac{d}{dt} m \vec{v} = m \vec{a} \quad (2.15)$$

O primeiro termo da equação, expresso no lado esquerdo, indica as forças que atuam no corpo, existindo dois tipos de forças distintos:

- (i) Forças de Corpo - atuam diretamente sobre a massa volumétrica do fluido. Estas forças atuam “à distância”, sendo exemplos a força gravitacional, elétrica e magnética ²²;
- (ii) Forças de superfície - atuam diretamente na superfície do elemento de fluido. Elas são devidas a duas fontes: (a) a distribuição de pressão na superfície, imposta pelo fluido externo ao elemento, e (b) as distribuições de tensão normal e de cisalhamento que atuam na superfície, impostas também pelo movimento do fluido externo na superfície por meio de atrito ²².

De uma forma geral, a equação do movimento pode ser descrita pela equação 16.

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\vec{\nabla} p - \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{g} \quad (2.16)$$

Em que $\vec{\nabla}p$ e $\vec{\nabla} \cdot \vec{\tau}$ representam as contribuições da distribuição de pressão e da distribuição de tensão normal para as forças de superfície, respetivamente, e $\rho \vec{g}$ indica a força de corpo.

Esta relação vetorial pode ser dividida em três relações escalares ao longo dos eixos x, y e z , obtendo-se, assim, três equações de momento para escoamento viscoso, descritas pelas equações 17 a 19.

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x \quad (2.17)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y \quad (2.18)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z \quad (2.19)$$

Assim, é necessário relacionar as equações de conservação de movimento linear com as tensões e deformações. Para estabelecer estas relações, considerou-se o fluido como newtoniano, isto é, a tensão de corte no fluido é proporcional à taxa de deformação. Para estes fluidos, Stokes, obteve os seguintes tensores ^{22,23}:

$$\tau_{xx} = \lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.20)$$

$$\tau_{yy} = \lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.21)$$

$$\tau_{zz} = \lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.22)$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (2.23)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad (2.24)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (2.25)$$

Onde μ é o coeficiente de viscosidade molecular e λ o segundo coeficiente de viscosidade ²².

2.4.3 Derivação das equações de Navier-Stokes

As equações de transporte (20 a 25) combinadas com a equação de momento, darão origem às equações de Navier-Stokes, 27 a 29, assumindo a hipótese estabelecida por Stokes representada na equação 26 ²².

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \rho f_x \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \rho f_y \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uw)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \nabla \cdot \vec{v} + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) + \rho f_z \quad (2.29)$$

As equações diferenciais de Navier-Stokes descrevem o escoamento de fluidos e permitem determinar os campos de velocidade e pressão nesses escoamentos, podendo ser escritas na forma vetorial pela equação 30.

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = -\vec{\nabla}p - \mu \nabla^2 \vec{v} + \rho \vec{g} \quad (2.30)$$

2.4.4 Equação da energia

A equação da conservação de energia resulta da primeira lei da termodinâmica, que, quando aplicada ao elemento fluido em movimento pode ser expressa pela equação 31 ^{22,23}:

$$\rho \frac{DE}{Dt} \Delta x \Delta y \Delta z = \sum \dot{Q} + \sum \dot{W} \quad (2.31)$$

Onde $\rho \frac{DE}{Dt} \Delta x \Delta y \Delta z$ representa a taxa de alteração de energia para o fluido em movimento e os dois termos representados por $\sum \dot{Q}$ e $\sum \dot{W}$ descrevem a taxa líquida de adição de calor ao fluido dentro do volume de controlo e a taxa líquida de trabalho realizado por forças superficiais no fluido, respetivamente ²³.

Combinando as contribuições de forças de superfície nas direções x, y e z , a equação de energia é expressa pela equação 32.

$$\begin{aligned} \rho \frac{DE}{Dt} = & \frac{\partial(u\sigma_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(v\sigma_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(w\sigma_{zz})}{\partial z} \\ & + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} - \frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Os fluxos de energia q_x , q_y e q_z são determinados pela aplicação da lei de condução de calor de Fourier, que relaciona o fluxo calorífico com o gradiente de temperatura local, onde λ representa a condutividade térmica.

$$q_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad q_y = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \quad q_z = -\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.33)$$

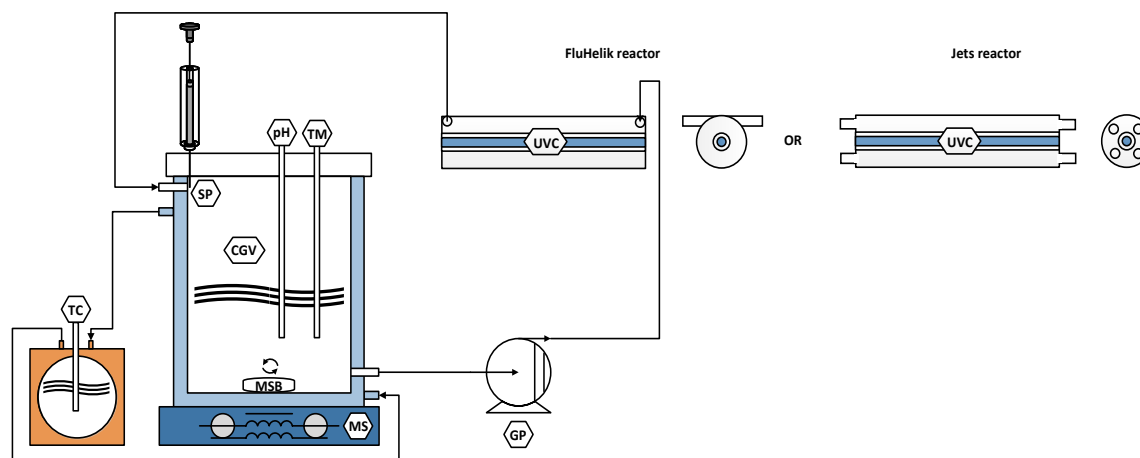
Assim, recorre-se a ferramentas computacionais que auxiliem a resolução das equações anteriormente mostradas, devido à sua complexidade e à grande quantidade de variáveis (parâmetros, propriedades e grandezas físicas) envolvidas, de modo a manter consistência dimensional. É de salientar que as aproximações efetuadas em CFD apresentam resultados de forma compacta e com maior generalidade ²¹.

3 Materiais e Métodos

3.1 Sistema experimental

A instalação experimental, à escala laboratorial, é constituída por um foto-reator e por um recipiente de vidro cilíndrico acoplado a um banho termostático e com agitação magnética.

Neste estudo, foram analisados dois reatores fotoquímicos tubulares laboratoriais, o foto-reator FluHelik e o foto-reator Jatos. O foto-reator FluHelik é constituído por um tubo cilíndrico de aço inoxidável (diâmetro interno de 72 mm; comprimento interno de 186 mm e espessura 2 mm) com entrada e saída tangenciais (diâmetro interno 6 mm e comprimento 43 mm) e por um tubo de quartzo concêntrico (diâmetro interno de 23 mm; comprimento de 186 mm e espessura de 1 mm), onde é colocada uma lâmpada Philips TUV G6T5 com 6 W de potência (1,7 W de potência para a radiação UVC). O foto-reator Jatos é constituído por um tubo de borossilicato (diâmetro interno de 65,6 mm, comprimento interno de 177 mm e espessura de 1,8 mm) com 12 entradas e 12 saídas equidistantes localizadas nas extremidades do tubo e por um tubo de quartzo concêntrico semelhante ao já mencionado. Na Figura 5, está representada a unidade experimental.



MS- Agitador Magnético

SMB - Barra de Agitação Magnética

GP - Bomba de Engrenagem

CGV - Recipiente de Vidro Cilíndrico

pH - medidor de pH

SP - Ponto de Amostragem

TC - Controlador de Temperatura

TM - Medidor de Temperatura

UVC - Lâmpada UVC

Figura 5. Esquema da instalação experimental à escala laboratorial, incluindo o reator FluHelik (FF) e o reator Jatos (FJ).

3.2 Modelo 3D dos Foto-Reatores em CFD

As simulações efetuadas para o estudo dos foto-reatores foram realizadas usando o código comercial CFD ANSYS Fluent.

A construção do modelo 3D do reator inicia-se com a criação do domínio geométrico onde as equações que descrevem o movimento dos fluidos e transporte de calor por condução, convecção e radiação são resolvidas. Este modelo foi criado na plataforma ANSYS Design Modeler 18.2®, de forma a permitir variar os parâmetros geométricos do reator e gerar a respetiva grelha para a simulação CFD automaticamente para a configuração em análise.

3.2.1 Desenho e Dimensões

Neste estudo, foram utilizados dois foto-reatores tubulares com geometrias diferentes, mas dimensões semelhantes. O foto-reator FluHelik apresenta uma configuração geométrica tubular com os tubos de entrada e saída tangenciais ao corpo do reator e o foto-reator Jatós consiste num reator tubular cujas entradas são paralelas ao corpo do reator. A Figura 6 e a Figura 7 exibem os desenhos do reator FluHelik e do reator Jatós, respetivamente, projetados em ANSYS Design Modeler 18.2®, e a Tabela 4 complementa as figuras, indicando as dimensões principais dos reatores para as unidades laboratoriais, aplicadas nos testes de simulação.

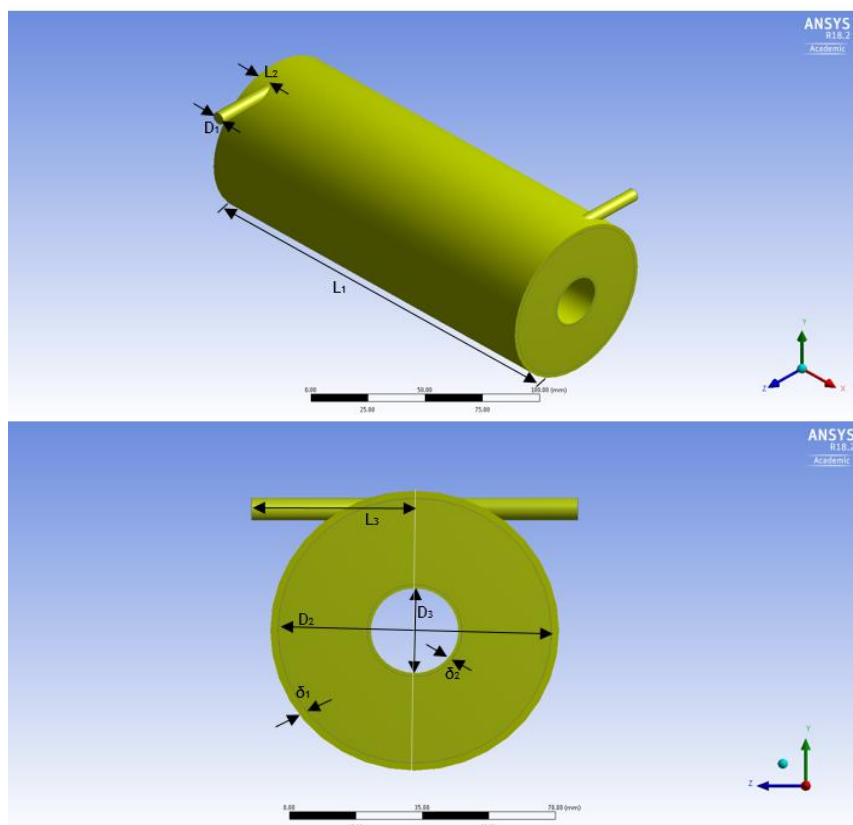


Figura 6. Modelo 3D do FluHelik.

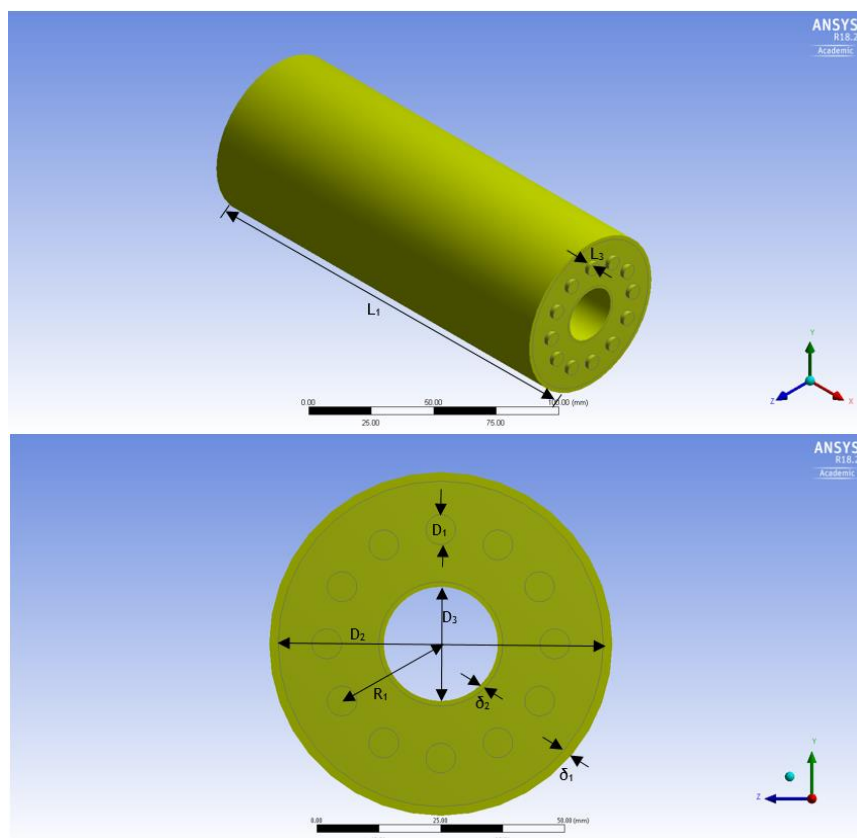


Figura 7. Modelo 3D do Foto-Reator Jatós.

Tabela 4. Dimensões dos foto-reatores

Parâmetro	Descrição do parâmetro	FluHelik	Jatós
L_1 (mm)	Comprimento do reator	186,0	177,0
L_2 (mm)	Distância entre o tubo entrada/saída e a base do reator	5,0	-
L_3 (mm)	Comprimento do(s) tubo(s) de entrada/saída	43,0	2,0
D_1 (mm)	Diâmetro interno do tubo de entrada/saída	6,0	3,0
D_2 (mm)	Diâmetro interno da carcaça do reator	72,0	65,6
D_3 (mm)	Diâmetro externo da manga de quartzo	23,0	23,0
R_1 (mm)	Distância do centro do reator à entrada/saída	-	23,0
δ_1 (mm)	Espessura da carcaça do reator	2,0	1,8
δ_2 (mm)	Espessura da manga de quartzo	1,0	1,0
Volume (L)	-	0,670	0,510

3.2.2 Grelha computacional

Após a geração do modelo computacional, é necessário discretizá-lo, isto é, subdividi-lo em pequenos volumes finitos que definem a grelha computacional e onde as equações são resolvidas. A criação da grelha é a etapa mais crítica da análise CFD, uma vez que a dimensão destes elementos pode influenciar a exatidão dos resultados devido a aproximações numéricas. Ao diminuir a dimensão dos elementos obtém-se uma malha com melhor discretização, mas simultaneamente com maior número de elementos, levando a um aumento do tempo de simulação. Assim, existe um compromisso entre a exatidão dos resultados e o esforço computacional necessário. A Figura 8 apresenta a grelha computacional utilizada na simulação do escoamento do fluido no foto-reator FluHelik, de duas diferentes perspetivas, e a Figura 9 apresenta a grelha do Foto-Reator Jatos.

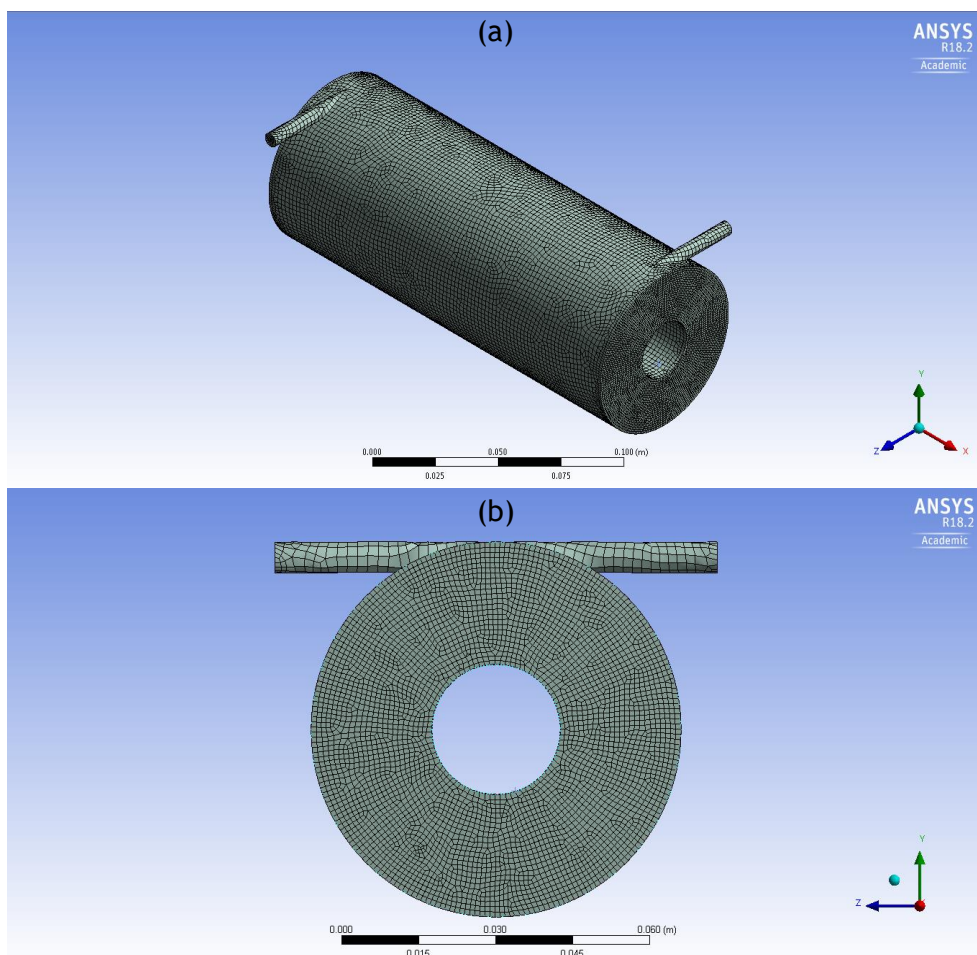


Figura 8. Grelha computacional do Foto-Reator FluHelik (a) perspetiva isométrica, (b) detalhe da secção reta.

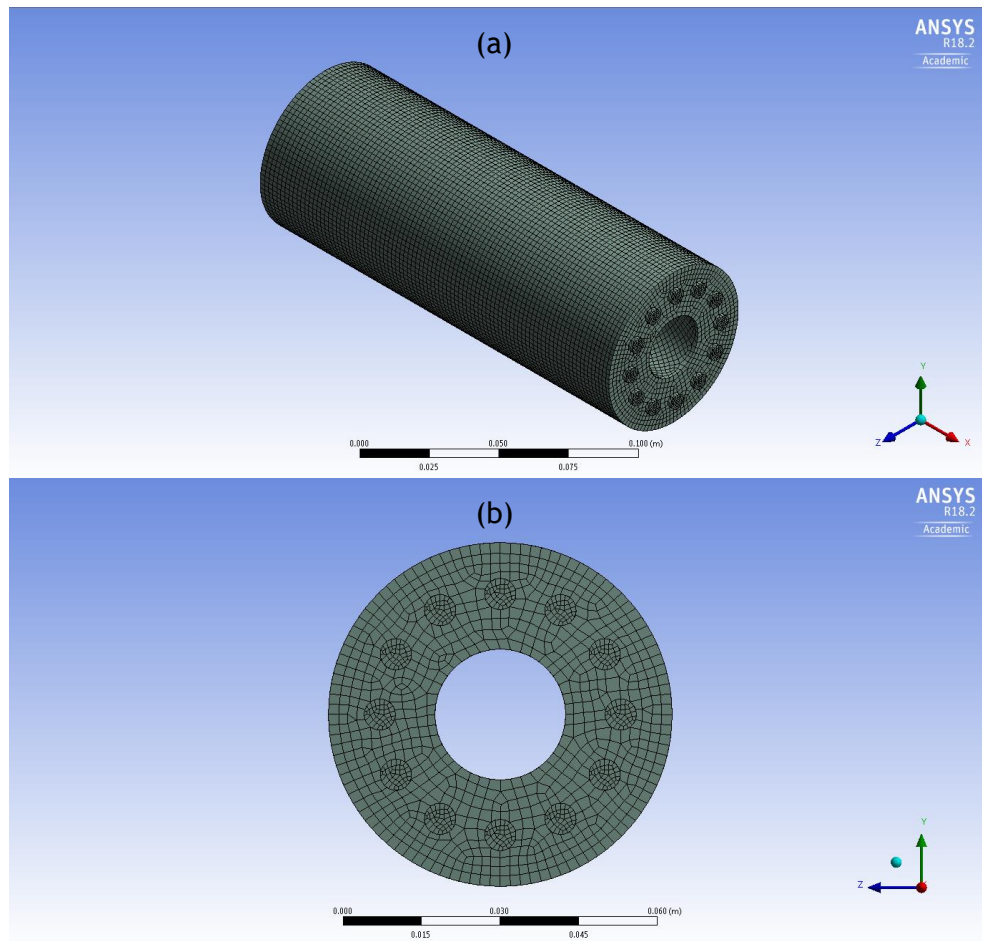


Figura 9. Grelha computacional do Foto-Reator Jatos (a) perspectiva isométrica; (b) detalhe da secção reta.

A grelha computacional foi gerada discretizando o domínio do fluxo usando uma mistura de elementos hexaédricos e tetraédricos. A grelha computacional foi gerada com o software ANSYS Meshing 18.2®, apresentando-se na Tabela 5 as suas principais características.

Tabela 5. Características da Mesh do Foto-Reator FluHelik e do Foto-reator Jatos.

Modelo 3D	FluHelik	Jatos
Tamanho mínimo de elemento (mm)	1,00	1,00
Tamanho máximo de elemento (mm)	2,00	2,00
Número total de elementos	175 mil	103 mil
Skewness (Assimetria)	0,36	0,37

O *Skewness* permite avaliar a perfeição geométrica de um elemento. Deste modo, valores de *skewness* próximos de 0 são preferíveis e próximos de 1 são inaceitáveis.

3.3 Propriedades físicas dos materiais utilizados

Na análise de CFD efetuada, considerou-se a água como o fluido existente na região anelar entre a manga de quartzo e a parede da carcaça, sendo as suas propriedades estimadas por modelos adequados existentes no ANSYS Fluent ®. Para as paredes da manga de quartzo e da lâmpada utilizaram-se as propriedades do *fused-quartz*^{24,25}. Assumiu-se que os fluidos não absorviam radiação. No que se refere às propriedades radiativas do *fused-quartz*, utilizaram-se valores diferentes do seu coeficiente de absorção, um na gama UV-Vis e outro na gama IR, para considerar a dependência do mesmo com o comprimento de onda da radiação incidente. Na Tabela 6 encontram-se as principais propriedades físicas utilizadas neste estudo.

Tabela 6. Propriedades físicas da água e do *fused-quartz*.

Propriedade	Água	<i>Fused-Quartz</i>
Densidade (kg m^{-3})	998,2	2200
Capacidade calorífica ($\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$)	4182	670
Condutividade térmica ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)	0,6	1,4
Viscosidade ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)	0,001	-
Coeficiente de absorção (m^{-1})	0	Banda UV-Vis: 0
		Banda IR: 921
Coeficiente de dispersão	0	0
Função de fase de dispersão	isotrópica	isotrópica
Índice de refração	1,3333	1,4585

3.4 Modelos físicos e condições-fronteira

As simulações foram realizadas no software comercial ANSYS Fluent 18.2 ® em estado estacionário. Para simular a hidrodinâmica, utilizou-se as equações de escoamento laminar, a opção *Viscous laminar* no ANSYS Fluent ® e o modelo $k-\epsilon$, para a resolução das equações do escoamento turbulento. Foi considerada ainda a transferência de calor por condução, convecção e por radiação, recorrendo-se ao modelo *Discrete Ordinates Non-Gray* com duas bandas (UV-Vis e IR) para esse efeito. Este modelo foi utilizado especificamente para considerar a dependência do coeficiente de absorção do *fused quartz* com o comprimento de onda da radiação incidente.

A simulação da distribuição da radiação UV-Vis no foto-reator é efetuada após a simulação da hidrodinâmica do sistema, utilizando-se como condição-fronteira térmica a geração de calor correspondente à radiação infravermelha emitida pela lâmpada e como condição-fronteira de radiação a intensidade da radiação UV emitida pela lâmpada. As condições-fronteira utilizadas no modelo em cada uma das etapas estão resumidas nas Tabela 7.

Tabela 7. Condições-fronteira da simulação térmica 3D do FluHelik.

Entrada de água	Temperatura: 20°C (temperatura ambiente)	
	Perfil de velocidades uniforme	
	$Q = 50 \text{ Lh}^{-1}$	$Q = 1100 \text{ Lh}^{-1}$
Saída da água	Escoamento paralelo	
	Pressão relativa: 0	
Parede da lâmpada	Geração de calor: $4,92 \times 10^3 \text{ W m}^{-3}$	
	Parede opaca, radiação difusa, $\varepsilon = 1$	
	Fluxo energético UV: $126,5 \text{ Wm}^{-2}$	
Parede da manga de quartzo	Parede semitransparente, radiação difusa, $\varepsilon = 1$	
Restantes paredes	Velocidade nula nas paredes (condição de não-deslizamento)	
	Adiabáticas (Fluxo energético: 0 kW m^{-2})	
	Opacas, radiação difusa, $\varepsilon = 1$	

3.4.1 Modelo Hidrodinâmico e de transferência de massa

Escoamento laminar

Para a simulação do funcionamento normal dos foto-reatores, recorreu-se a um modelo CFD 3D de escoamento laminar baseado nas equações de *Reynolds Average Navier-Stokes* (RANS).

Assumindo que o fluido (mistura de água) é newtoniano, incompressível, isotérmico, com propriedades físicas constantes e que o escoamento se encontra em estado estacionário laminar, foram utilizadas as equações de RANS para prever o transporte hidrodinâmico (campos de velocidade média) e a transferência de massa, sendo representadas pelas equações seguintes ²⁶:

Equação da conservação da massa:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.1)$$

Equação da conservação do momento:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p - \nabla \cdot \bar{\tau} \quad (3.2)$$

Onde o tensor, $\bar{\tau}$, é dado por:

$$\bar{\tau} = \mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) \quad (3.3)$$

Equação da conservação das espécies:

$$\nabla \cdot (\rho V m_i) = -\nabla \cdot J_i, i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (3.4)$$

Onde o fluxo difusivo de espécies i é estimado através da primeira Lei da Difusão de Fick, representada na equação seguinte:

$$J_i = -D_m \nabla(\rho m_i) \quad (3.5)$$

Nas equações 1 a 5, ρ representa a densidade, $\vec{v}$ a velocidade, p a pressão, τ o tensor de tensão viscosa, μ a viscosidade molar, u o tensor unitário, m a fração mássica das espécies, J_i o fluxo difusivo das espécies i , N o número total de espécies e D_m corresponde à difusividade molecular a espécie i na mistura. Deve-se notar que o papel da gravidade não foi considerado, uma vez que os gradientes de densidade no reator são desprezáveis ²⁶.

Escoamento turbulento

Adicionalmente, realizou-se uma simulação em regime de escoamento turbulento, recorrendo-se ao modelo $k - \varepsilon$. As equações de RANS foram usadas para prever os campos de velocidade média e pressão para um fluido incompressível em estado estacionário, resolvendo a equação de continuidade:

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (3.6)$$

E a equação de conservação do momento:

$$\vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \nabla \cdot ((\mu + \mu_t)(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T)) \quad (3.7)$$

Em que $\vec{v}$ é o vetor de velocidade média no tempo, p é a pressão relativa média no tempo e ρ a densidade do fluido. μ e μ_t representam, respetivamente, a viscosidade cinemática molecular e a viscosidade cinemática turbulenta ou a difusividade do momento turbulento, que foi determinada por um modelo de viscosidade turbulenta. Deste modo, a resolução da equação de conservação de momento foi obtida através do modelo padrão de turbulência $k - \varepsilon$. Portanto, a viscosidade turbulenta foi calculada a partir da energia cinética turbulenta k e a taxa de dissipação de turbulência ε de acordo com:

$$\mu_t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.8)$$

Onde C_μ é uma constante empírica do modelo $k - \varepsilon$ que tem o valor padrão de 0,09.

Como condição-fronteira, utilizou-se na entrada do foto-reator um caudal de 1100 L h^{-1} , de modo a obter condições de escoamento totalmente turbulentas. No limite de entrada, foi imposto um perfil de velocidade constante e uniforme com a velocidade, u_{inlet} , calculada a partir da razão entre o caudal e a área de entrada, A_{inlet} . Para as entradas foi especificada

uma intensidade de turbulência $I_t = 5\%$ e o diâmetro hidráulico do tubo de entrada, D_h , foi considerado como a dimensão relevante para a estimativa de k na condição limite de entrada como:

$$k = \frac{3}{2} (u_{\text{inlet}} I_t)^2 \quad (3.9)$$

e ε como:

$$\varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4}}{0.07 D_h} k^{3/2} \quad (3.10)$$

Os valores de k e ε na entrada foram calculados usando as equações anteriores. Na formulação do modelo $k - \varepsilon$ considera-se que as flutuações turbulentas são isotrópicas, ocorre equilíbrio local dos termos de produção e dissipação e o número de Reynolds do escoamento é elevado.

3.4.2 Modelo de distribuição de radiação

A modelação de um reator fotoquímico requer a resolução da equação de transferência radiante (RTE), apresentada no capítulo 2 (equação 8). A solução desta equação permite a avaliação do campo de radiação em qualquer ponto do reator. Uma vez conhecidas as intensidades, a radiação incidente pode ser prontamente obtida e o LVREA pode ser calculado multiplicando este valor pelo coeficiente de absorção.

A distribuição da irradiação UV dentro dos reatores foi estabelecida usando o *Discrete Ordinates Method (DOM) Non-Gray* com UV-Vis e bandas IR para simular a transferência de radiação e considerando a transferência de calor por condução e convecção. Este modelo permite levar em consideração a variação do coeficiente de absorção do quartzo fundido com o comprimento de onda da radiação incidente.

A implementação do *DOM Non-Gray* divide o espectro de radiação em N faixas de comprimento de onda, que não precisam de ser próximas ou iguais em extensão. Os intervalos de comprimento de onda são definidos pelo utilizador e correspondem a valores no vácuo ($n = 1$). A RTE é integrada em cada intervalo de comprimento de onda (λ), resultando em equações de transporte para a quantidade $I_\lambda \Delta\lambda$, que corresponde à energia radiante (I_λ) contida na faixa de comprimento de onda ($\Delta\lambda$). O comportamento em cada banda é considerado cinza. A emissão do corpo negro na faixa de comprimento de onda por unidade de ângulo sólido é escrita como ²⁰:

$$[F(0 \rightarrow n\lambda_2 T) - F(0 \rightarrow n\lambda_1 T)] n^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (3.11)$$

onde $F(0 \rightarrow n\lambda T)$ é a fração de energia radiante emitida por um corpo negro no intervalo de comprimento de onda de 0 a λ , à temperatura T , num meio com índice de refração, n . λ_1 e λ_2 são os comprimentos de onda limites da banda considerada.

A intensidade total $I(\vec{r}, \vec{s})$ em cada direcção $\vec{s}$ na posição $\vec{r}$ é calculada através da seguinte expressão:

$$I(\vec{r}, \vec{s}) = \sum_k I_{\lambda_k}(\vec{r}, \vec{s}) \Delta\lambda_k \quad (3.12)$$

Onde o somatório é sobre as bandas de comprimentos de onda.

Este método resolve a RTE para um número finito de ângulos sólidos discretos, cada um associado a uma direção de vetor. Ao usar o DOM, a discretização espacial da região computacional é obtida diretamente da topologia da rede da malha. No entanto, a discretização direcional para a RTE foi explicitamente especificada usando uma discretização angular do octante esférico de 8×8 divisões (o suficiente para evitar o conhecido “efeito de raio”) e 3×3 pixelagem (suficiente para superar o ângulo saliente) ²⁷.

3.4.3 Critérios de convergência e Estratégia de solução

O método de resolução de estado estacionário segregado foi utilizado para resolver as equações governantes. O algoritmo SIMPLE foi escolhido para o acoplamento pressão-velocidade, em todas as simulações e o esquema de discretização é apresentado na Tabela 8.

Tabela 8. Esquema de discretização das simulações dos reatores FluHelik e Jatos.

	Gradiente	Pressão	Momento	Energia	DO
FluHelik Laminar	<i>Least Square Cell Based</i>	<i>Second Order</i>	<i>Second Order Upwind</i>	<i>Second Order Upwind</i>	<i>First Order Upwind</i>
Jatos Laminar	<i>Least Square Cell Based</i>	<i>Second Order</i>	<i>First Order Upwind</i>	<i>Second Order Upwind</i>	-
FluHelik Turbulento	<i>Least Square Cell Based</i>	<i>Second Order</i>	<i>Second Order Upwind</i>	<i>Second Order Upwind</i>	-
Jatos Turbulento	<i>Least Square Cell Based</i>	<i>Second Order</i>	<i>Second Order Upwind</i>	<i>Second Order Upwind</i>	-

Na simulação do Foto-reator Jatos em regime laminar utilizou-se, ainda, *High Order Term Relaxation* para as variáveis de escoamento, com um fator de 0,25. Esta opção tenta manter uma boa convergência, mudando entre o esquema de primeira e segunda ordem localmente, onde os padrões de divergência são identificados em células específicas do domínio. A convergência da solução numérica foi assegurada pela monitoração dos resíduos, tendo em conta os critérios apresentados da Tabela 9.

Tabela 9. Critérios de convergência para o valor máximo dos resíduos das simulações.

Variável	Critério de convergência
Continuidade	10^{-3}
Velocidade - x	10^{-3}
Velocidade - y	10^{-3}
Velocidade - z	10^{-3}
Energia	10^{-6}
Tracer	10^{-3}
Radiação (DO)	10^{-6}

Para realizar as simulações, os modelos foram resolvidos em duas etapas: primeiro o campo de escoamento (equações de conservação de massa e momento) e, depois, o campo de radiação. O escoamento de fluidos e o balanço de radiação foram resolvidos em estado estacionário. A experiência de injeção de *tracer* foi simulada em modo transiente. Esta estratégia pode ser usada quando os campos de velocidade e radiação não interagem, economizando tempo computacional e proporcionando estabilidade ao sistema.

O intervalo de tempo (Δt) associado a cada simulação dinâmica é apresentado na Tabela 10, e é calculado tendo em conta a velocidade média do fluido à entrada (u_{inlet}) e o tamanho mínimo dos elementos da grelha computacional (Δx), através da seguinte expressão:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{u_{inlet}} \quad (3.13)$$

Tabela 10. Dados das simulações transientes.

Simulação	Foto-reator	Regime	$u_{inlet} \text{ (ms}^{-1}\text{)}$	$\Delta x \text{ (m)}$	$\Delta t \text{ (s)}$
DTR	FluHelik	<i>laminar</i>	0,5	10^{-3}	2×10^{-3}
DTR	Jatos	<i>laminar</i>	0,164	10^{-3}	10^{-2}
DTR	FluHelik	<i>turbulento</i>	11	10^{-3}	10^{-4}
DTR	Jatos	<i>turbulento</i>	3,60	10^{-3}	2×10^{-4}

3.5 Comportamento hidrodinâmico

3.5.1 Caracterização da Distribuição dos tempos de residência

A distribuição dos tempos de residência (DTR) das partículas de fluido foi determinada efetuando uma simulação em estado transiente de uma experiência de injeção de *tracer*. Partindo do campo de velocidades estacionário, foi analisada a resposta do sistema a uma perturbação em degrau de amplitude 1, ou seja, a concentração de *tracer* na entrada foi alterada no instante inicial de 0 para 1.

Foi utilizado o modelo *Species Transport*, tendo-se definido um *tracer* inerte ao escoamento, isto é, com propriedades idênticas às do fluido de trabalho para que a hidrodinâmica do sistema não fosse afetada. Assumindo-se uma difusividade mássica da mistura de $10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, procedeu-se à monitorização da concentração de *tracer* à saída, para cada intervalo de tempo.

A concentração média do *tracer* ponderada pelo fluxo, isto é, a função de distribuição cumulativa do tempo de residência, $F(t)$, foi registada na saída, ao longo da simulação transiente, como:

$$F(t) = \frac{\int_{A_{\text{out}}} c(\vec{x}, t) \vec{v}(\vec{x}) \cdot \vec{n} dA}{Q} \quad (3.14)$$

onde $\vec{n}$ é o vetor normal à fronteira de saída, sendo a área A_{out} e $\vec{v}$ o vetor velocidade.

A função da DTR, $E(t)$, é determinada de acordo com a equação seguinte:

$$E(t) = \frac{dF(t)}{dt} \quad (3.15)$$

$E(t)$ representa a fração de fluido à saída do reator entre t e $t + dt$, assim $\int_0^\infty E(t) dt = 1$.

O tempo de residência médio ($\bar{t}_r$) é obtido através da expressão 16.

$$\bar{t}_r = \int_0^\infty t * E(t) dt \quad (3.16)$$

$\bar{t}_r$ é comparado com o tempo de passagem (τ) no reator, obtido pela equação seguinte:

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad (3.17)$$

onde V é o volume do reator e Q é o caudal.

A comparação do tempo de residência médio com o tempo de passagem no sistema, permite verificar se o escoamento é ideal ($\tau = \bar{t}_r$) ou identificar o tipo de desvio ao escoamento ideal. Se o tempo de passagem é superior ao tempo de residência ($\tau > \bar{t}_r$), acontece a formação de volumes mortos (zonas estagnadas), obtendo-se a fração destes através da equação 18.

$$\frac{V_m}{V} = 1 - \frac{\bar{t}_r}{\tau} \quad (3.18)$$

Outro parâmetro para avaliação da DTR, é a variância da distribuição, σ^2 , que permite conhecer a dispersão da distribuição em torno do seu valor médio, sendo calculado através da expressão seguinte.

$$\sigma^2 = \int_0^\infty (t - \bar{t}_r)^2 E(t) dt \quad (3.19)$$

As funções de DTR são apresentadas, para análise dos resultados, na sua forma normalizada. Assim, define-se o tempo de residência adimensional, θ :

$$\theta = \frac{t}{\tau} \quad (3.20)$$

A função densidade de tempos de residência fica:

$$E(\theta) = \tau E(t) = \tau E(\theta\tau) \quad (3.21)$$

E a função F de Danckwerts adimensional não sofre alterações e vem:

$$F(\theta) = F(t) = F(\theta\tau) \quad (3.22)$$

4 Resultados e Discussão

4.1 Simulação hidrodinâmica

Na análise da configuração via CFD, para simular a hidrodinâmica dos sistemas, a escolha do modelo de escoamento foi determinada pelo cálculo do número de Reynolds (Re) à entrada do reator e no interior do reator, determinado através da equação 1, utilizando as propriedades da água, descritas no capítulo anterior.

$$Re = \frac{\rho \times u_{inlet} \times d}{\mu} \quad (4.1)$$

onde ρ é a massa volúmica da água, u_{inlet} a velocidade de entrada, d o diâmetro e μ a viscosidade da água.

Apresenta-se na Tabela 11 os resultados obtidos relativamente ao Re, bem como alguns dados afetos às simulações dos reatores fotoquímicos.

Tabela 11. Dados e Resultados da simulação.

Reator	FluHelik	FluHelik	Jatos	Jatos
Regime	Laminar	Turbulento	Laminar	Turbulento
$Q \text{ (L h}^{-1}\text{)}$	50	1100	50	1100
$u_{inlet} \text{ (m s}^{-1}\text{)}$	0,50	11	0,164	3,60
Re_{inlet}	$2,95 \times 10^3$	$6,5 \times 10^5$	$4,92 \times 10^2$	$1,08 \times 10^4$
Re_{reator}	$1,82 \times 10^2$	$4,0 \times 10^3$	$1,95 \times 10^2$	$3,59 \times 10^3$
$\Delta p_{reator} \text{ (Pa)}$	149,2	—	13,5	—
$P_{dissipada} \text{ (W)}$	0,05	0,25	0,01	1,05

Note-se que na tabela não se apresentam os valores da queda de pressão para as simulações em regime turbulento, pois escoamentos turbulentos são significativamente afetados pela presença de paredes, as principais responsáveis pela existência de vórtices e turbulência. Junto às paredes, a velocidade e a pressão variam constantemente. Assim, para obter um resultado válido seria necessário um refinamento da grelha computacional junto das paredes.

4.1.1 Caracterização do campo de escoamento do Foto-Reator FluHelik

Para a caracterização do escoamento no interior do Foto-Reator FluHelik, recorreu-se ao estudo das trajetórias (*pathlines*), linhas de corrente (*streamlines*) e mapa de vetores de velocidade no interior do reator, em estado estacionário.

Trajeto rias

As *pathlines* (trajeto rias) s o as linhas percorridas por part culas em equil brio com o movimento do fluido. As *pathlines* s o uma excelente ferramenta para visualiza  o de escoamentos tridimensionais complexos. Deste modo, primeiramente, realizou-se a an lise destas linhas, em termos da magnitude de velocidade, para se compreender o escoamento no foto-reator. As Figuras 10 e 11 apresentam as trajet rias das part culas para o foto-reator FluHelik, em tr s perspectivas diferentes.

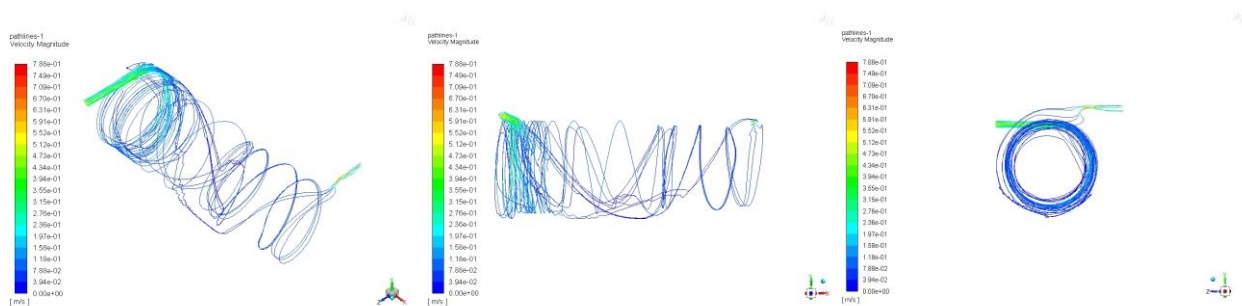


Figura 10. Pathlines, em termos de magnitude de velocidade, do escoamento laminar do foto-reator FluHelik, em estado estacion rio.

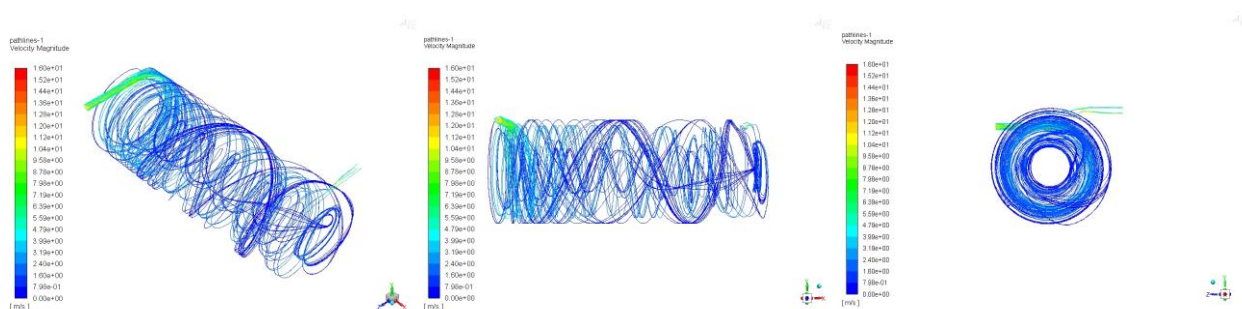


Figura 11. Pathlines, em termos de magnitude de velocidade, do escoamento turbulento do foto-reator FluHelik, em estado estacion rio.

As *pathlines* obtidas para o foto-reator FluHelik indicam que o escoamento tridimensional apresenta uma forma helicoidal em torno na manga de quartzo, para as duas velocidades de entrada estudadas. Deste modo, a configura  o geom trica deste reator permite maximizar a turbul ncia do fluido, promovendo a sua mistura, isto  , o escoamento   caracterizado pelo

movimento tridimensional aleatório das partículas do fluido sobreposto ao movimento da corrente.

O aumento da velocidade de entrada e consequente passagem de regime laminar para turbulento faz com que o movimento do fluido seja mais definido no interior do reator, promovendo de forma mais eficaz a mistura.

Linhas de Corrente

As linhas de corrente permitem igualmente a visualização do campo de escoamento nos reatores tubulares, sendo linhas tangentes aos vetores velocidade, num dado instante.

A Figura 12 mostra as linhas de corrente de magnitude de velocidade calculadas para o foto-reator FluHelik, assumindo um modelo de escoamento laminar e a Figura 13 apresenta as linhas de corrente associadas ao escoamento turbulento.

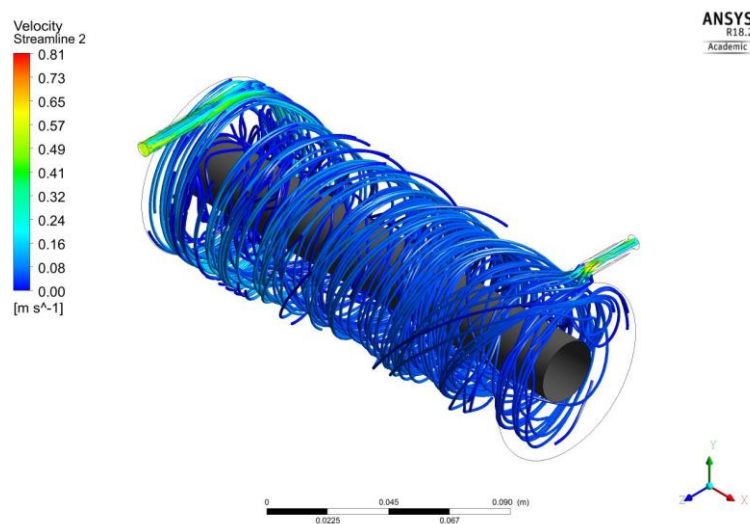


Figura 12. Linhas de corrente no Foto-Reator FluHelik em escoamento laminar.

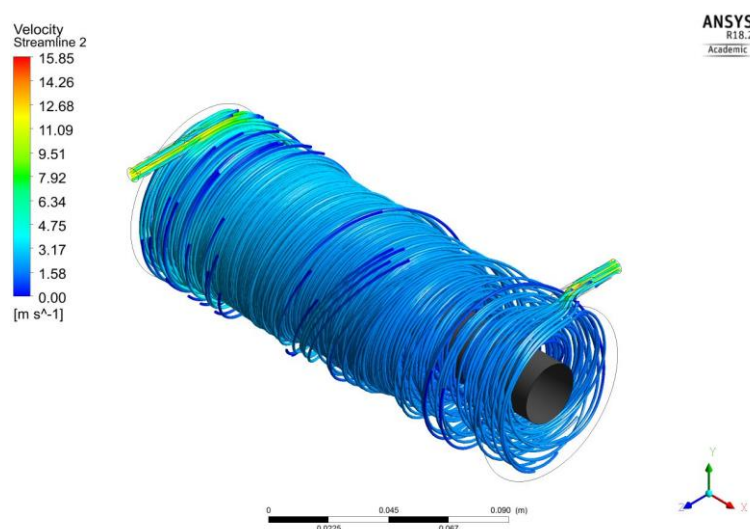


Figura 13. Linhas de corrente no Foto-Reator FluHelik em escoamento turbulento.

O foto-reator FluHelik apresenta um escoamento helicoidal em torno da manga de quartzo, como se demonstra nas Figuras 12 e 13. É muito claro, a partir das linhas de corrente, que o fluxo não é uniforme na região anelar.

Verifica-se que o aumento de velocidade no foto-reator FluHelik promove, como seria de prever, um maior gradiente de velocidades no interior do reator, provocando um movimento helicoidal melhor definido em torno da manga de quartzo.

Mapas de Vetores de Velocidade

Uma das variáveis mais importantes no estudo do escoamento é a velocidade. As Figuras 14 e 15 apresentam os mapas da magnitude de velocidade no foto-reator FluHelik, para os dois regimes em estudo.

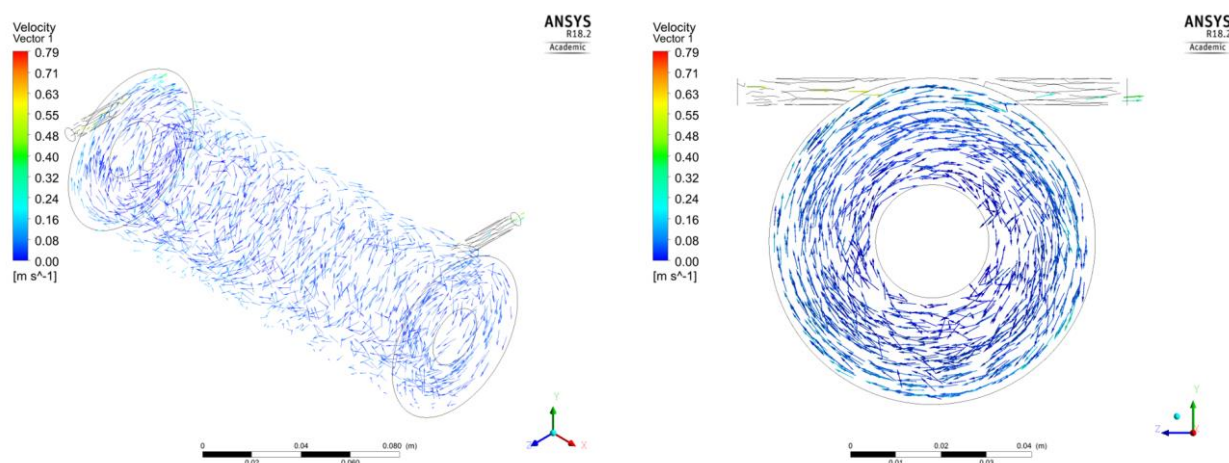


Figura 14. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator FluHelik, para o escoamento laminar, (a) perspectiva isométrica e (b) detalhe da secção reta.

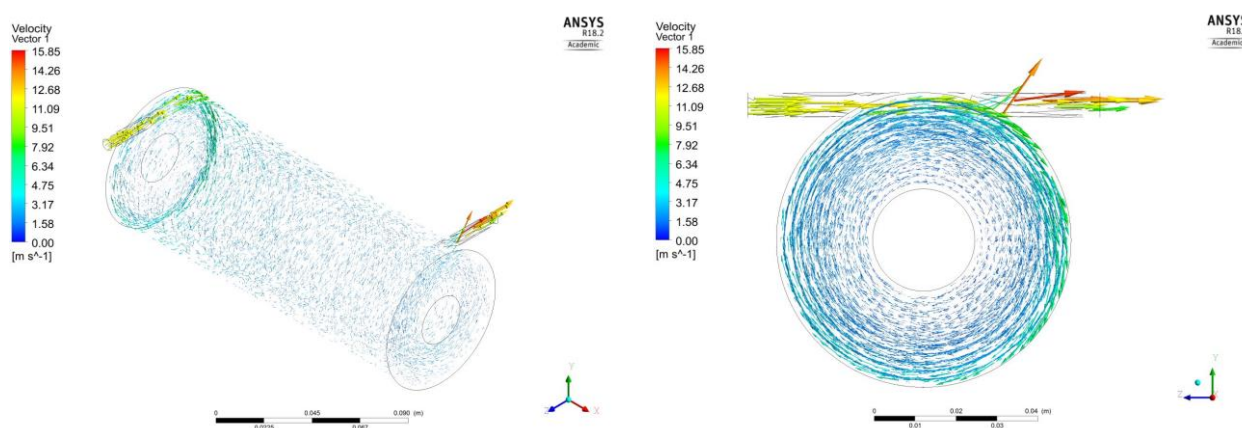


Figura 15. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator FluHelik, para o escoamento turbulento, (a) perspectiva isométrica e (b) detalhe da secção reta.

Através dos mapas de velocidade (mapa de vetores, *streamlines* e *pathlines*), aferiu-se que a velocidade nos tubos de entrada e saída tangenciais é superior à velocidade no interior do corpo do reator, o que se deve à dimensão reduzida do tubo de entrada face à do reator. As Figuras 14 e 15 representativas dos vetores da magnitude de velocidade no foto-reator FluHelik, mostram, ainda, que as velocidades mais altas foram localizadas perto da parede e as velocidades mais baixas perto da lâmpada UVC, o que prolonga o tempo de contato desses elementos do fluido com a radiação UVC.

4.1.2 Caracterização do campo de escoamento do Foto-Reator Jatos

Para a caracterização do escoamento no interior do Foto-Reator Jatos, recorreu-se ao estudo dos mesmos elementos anteriormente descritos para o Foto-Reator FluHelik.

Trajétórias

As Figuras 16 e 17 apresentam as trajetórias das partículas para o foto-reator Jatos, em três diferentes perspetivas.

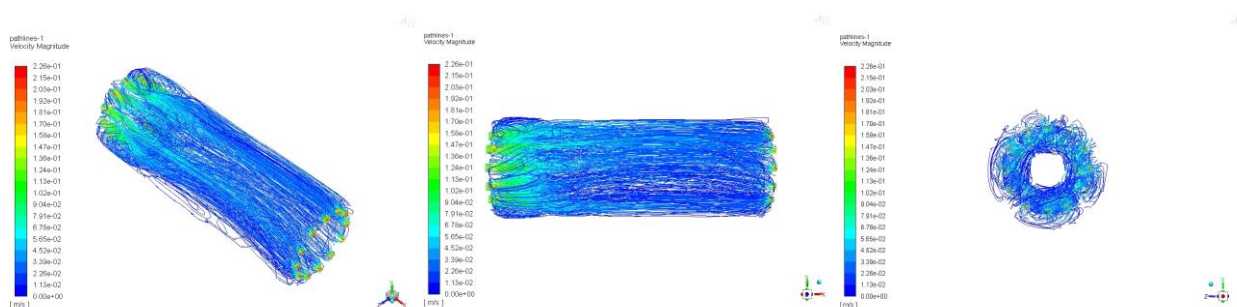


Figura 16. Pathlines, em termo de magnitude de velocidade, do escoamento laminar do foto-reator Jatos, em estado estacionário.

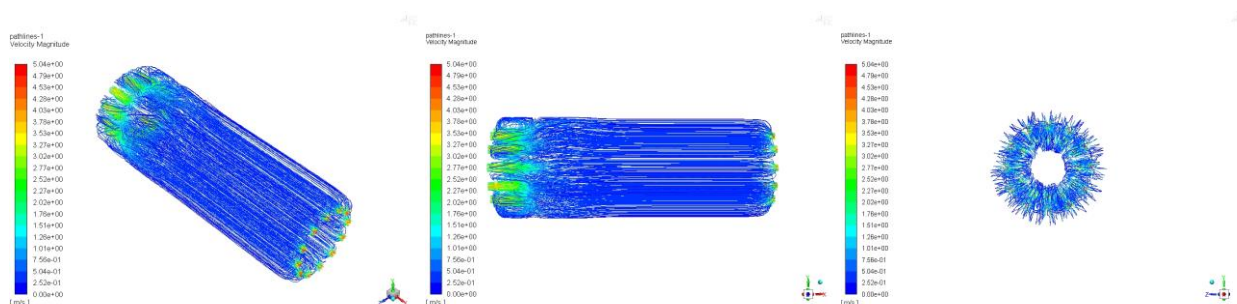


Figura 17. Pathlines, em termo de magnitude de velocidade, do escoamento turbulento do foto-reator Jatos, em estado estacionário.

As trajetórias definidas pelas partículas no interior do foto-reator Jatos sugerem um escoamento axial ao longo do reator. Com o aumento do número de Reynolds, verifica-se que as *pathlines* indicam uma trajetória melhor definida diminuindo as zonas de recirculação verificadas para regime laminar.

Linhas de Corrente

A Figura 18 apresenta as linhas de corrente para o foto-reator Jatos com funcionamento em regime laminar, enquanto a Figura 12 apresenta as linhas de corrente utilizando um modelo turbulento. É, ainda, importante referir, que se considerou que o caudal de entrada se distribui equitativamente pelos 12 jatos de entrada, no foto-reator Jatos.

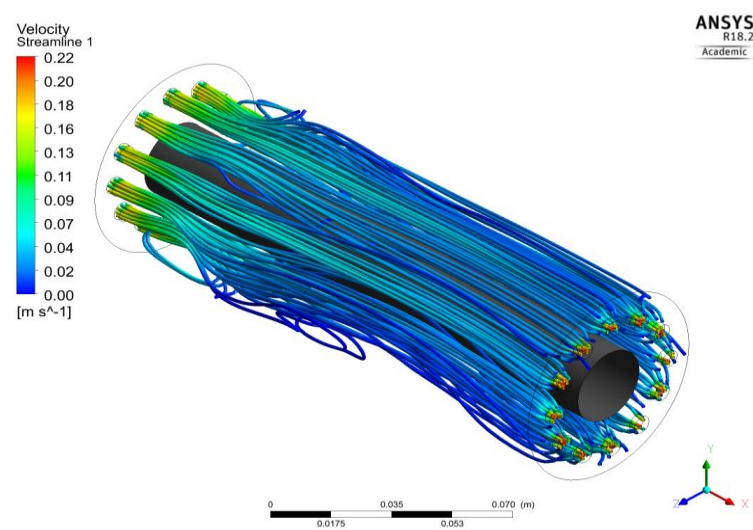


Figura 18. Linhas de corrente no Foto-Reator Jatos em escoamento laminar.

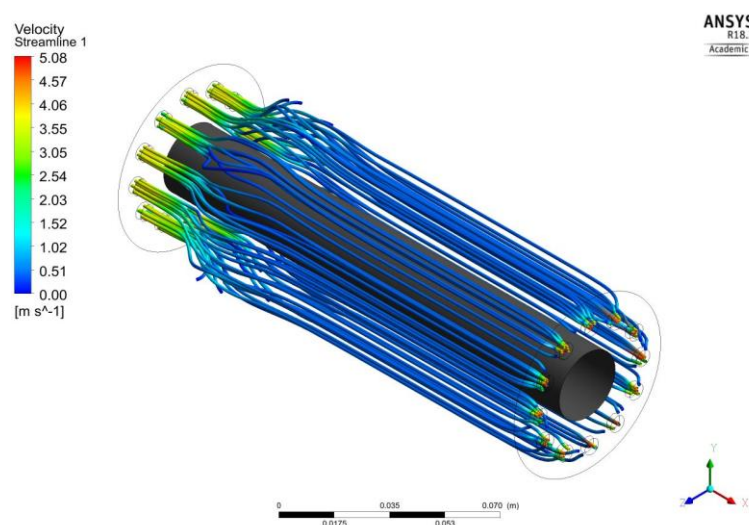


Figura 19. Linhas de corrente no Foto-Reator Jatos em escoamento turbulento.

A configuração do foto-reator Jatos promove um escoamento axial ao longo da seção tubular. Através das linhas de corrente, infere-se que o fluxo não é uniforme e ainda que há zonas de recirculação. Verifica-se que o aumento do caudal de entrada provoca uma diminuição das zonas de recirculação e um escoamento axial melhor definido.

Mapas de Vetores de Magnitude de Velocidade

A Figura 20 e 21 representam os vetores da magnitude de velocidade no foto-reator Jatos.

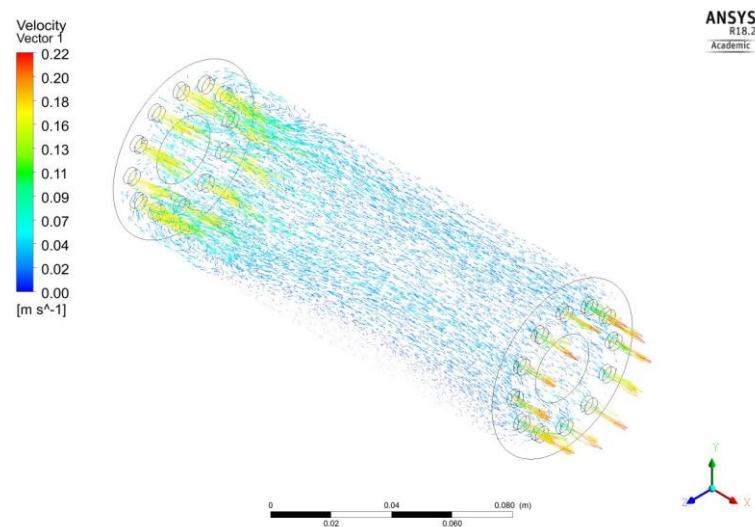


Figura 20. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator Jatos para escoamento laminar.

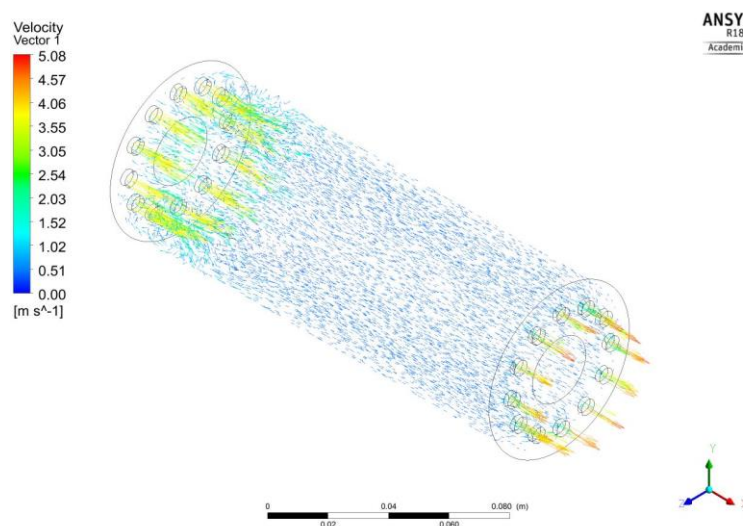


Figura 21. Mapa de vetores da magnitude de velocidade no foto-reator Jatos para o escoamento turbulento.

Os mapas de magnitude da velocidade mostram gradientes de velocidade e velocidades máximas muito maiores nas entradas e saídas do reator devido às reduzidas dimensões dos Jatos, quando comparados com as dimensões do próprio reator.

4.1.3 Caracterização da Distribuição dos Tempos de Residência

Para prever o comportamento hidrodinâmico dos reatores fotoquímicos determinou-se quantitativamente a saída de fluxo no reator, a partir dos modelos ideais, e as possíveis consequências para o funcionamento do sistema. Isto é, determinou-se a DTR, uma vez que fornece uma visão macroscópica das características do escoamento, indicando a qualidade da mistura no interior do reator. A DTR numérica foi simulada através resolução de uma equação de transporte de massa transiente no domínio do reator.

Para a caracterização do reator, foram obtidas as DTR's sem considerar a fonte radiação, uma vez que se determinou previamente que o escoamento e a distribuição da radiação no interior do reator são independentes.

Para as simulações considerou-se uma alteração da concentração de *tracer* de 0 para 1 no instante inicial, que pode ser descrita pela função degrau de Heaviside.

$$H(t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t \geq 0 \end{cases} \quad (4.2)$$

À saída dos reatores, monitorizou-se a concentração de *tracer* em função do tempo, obtendo-se diretamente as curvas F de Danckwerts adjacentes a cada simulação efetuada, apresentadas na Figura 22.

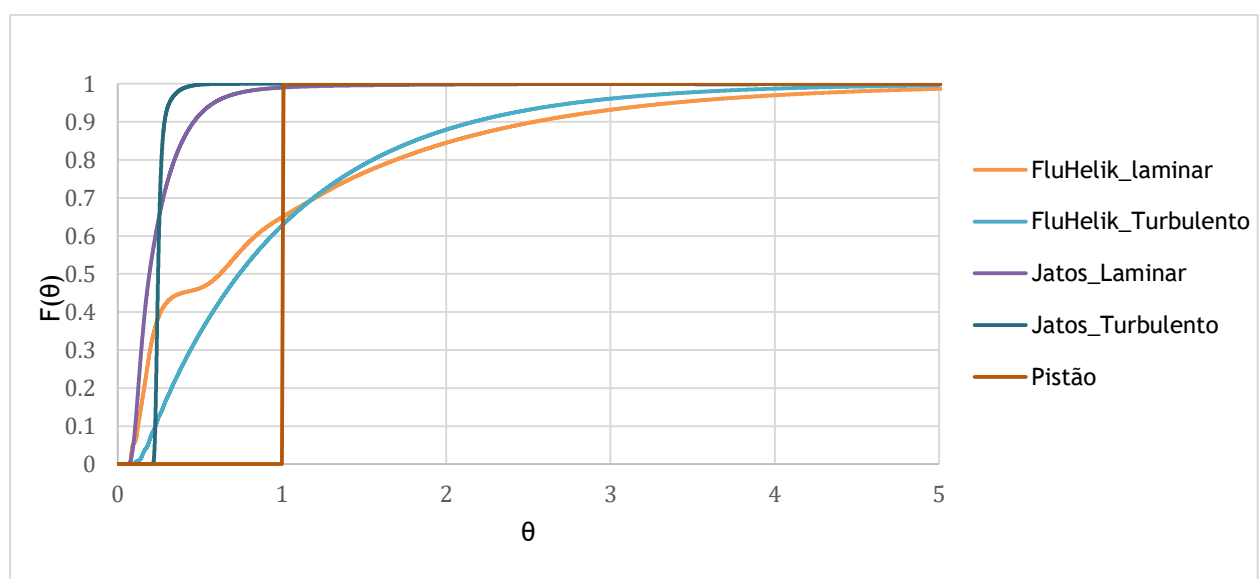


Figura 22. Perfis da concentração de tracer à saída dos foto-reatores em função do tempo normalizado (θ).

Os perfis de concentração de tracer, exibidos na Figura 22, confirmam claramente a não idealidade do fluxo dentro do volume do reator, uma vez que, nas condições simuladas, a função F de Danckwerts se desvia do comportamento ideal do reator pistão, representado pela linha “Pistão”.

Em seguida, na Figura 23 apresenta-se a curva da função $E(\theta)$, obtida através do tratamento matemático da função $F(\theta)$.

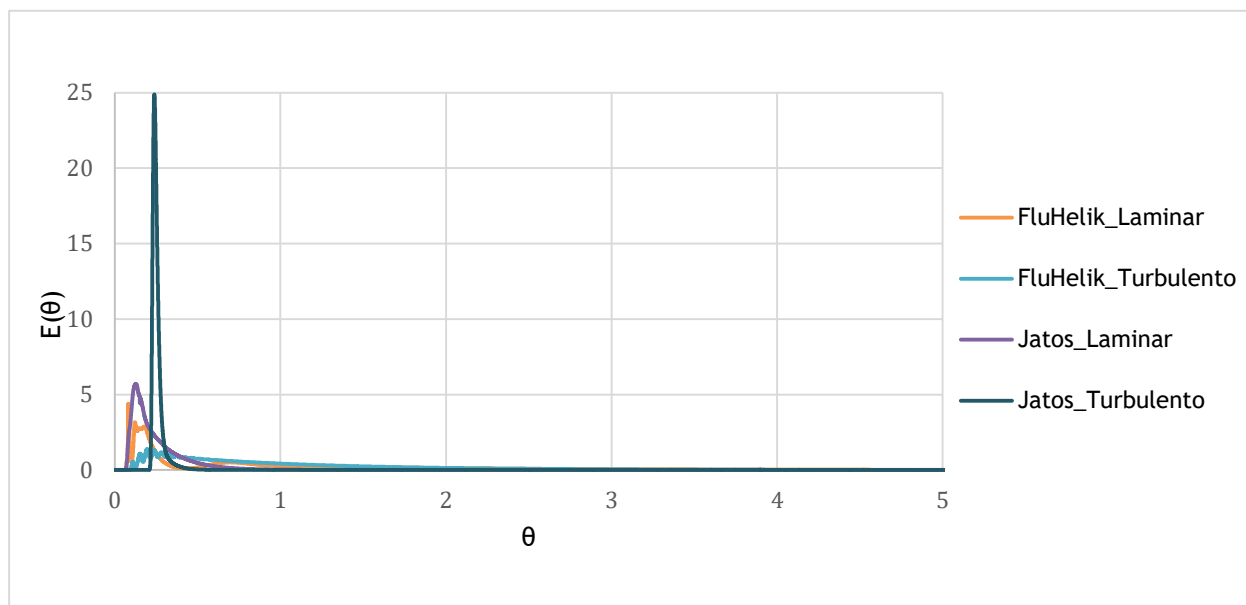


Figura 23. Curva da DTR dos foto-reatores em função do tempo normalizado (θ).

A curva da DTR representa a distribuição de idades do fluido à saída dos foto-reatores, permitindo obter o tempo de residência de uma porção ou elemento de fluido. A idade de um elemento de fluido é o tempo compreendido entre a sua entrada no reator e um instante dado. Os diversos elementos de um fluido passam por diferentes caminhos no interior do reator, desde a sua entrada até à saída, sendo desta forma perceptível que terão diferentes tempos de residência.

Deste modo, verifica-se através da curva DTR que o foto-reator Jatos apresenta volumes mortos, isto é, zonas estagnadas, uma vez que o tempo de residência médio simulado é inferior ao tempo de passagem teórico. Verificou-se, ainda, que o aumento do caudal no foto-reator FluHelik, fez com o que o escoamento se aproximasse mais do escoamento do reator pistão.

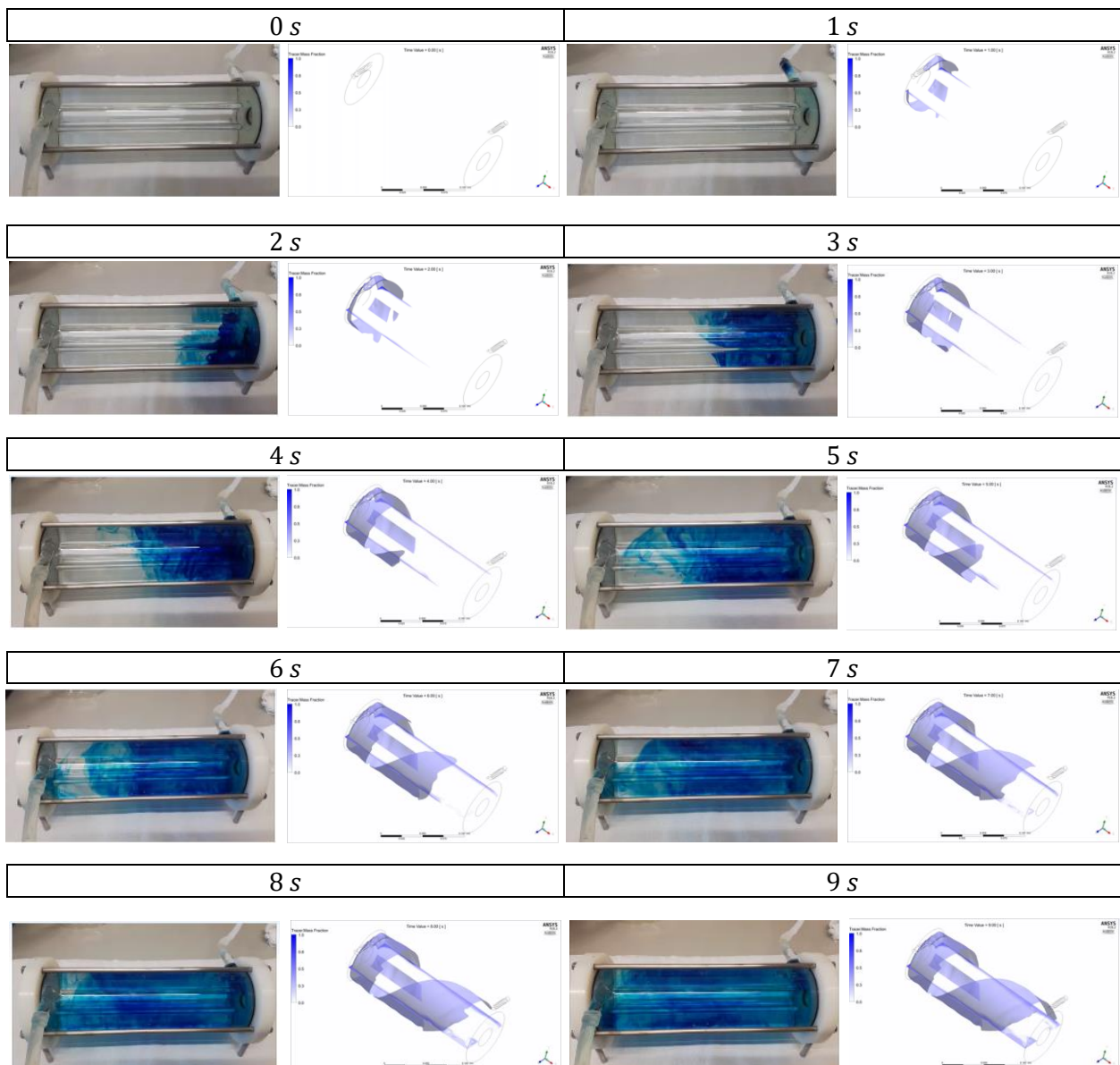
Pela análise da Figura 23, infere-se que o foto-reator FluHelik com funcionamento em regime turbulento apresenta um maior grau de mistura, uma vez que o pico da curva $E(\theta)$ é menor, sendo este o funcionamento mais eficaz. Já para o reator de Jatos, em regime turbulento, verifica-se um aumento abrupto do pico e um atraso na saída do *tracer*, indicando que a

dispersão do *tracer* é menor nestas condições. Assim, o escoamento promovido pelo foto-reator FluHelik apresenta vantagens face ao do reator de Jatos.

4.1.4 Comparação dos Resultados Experimentais e Computacionais da DTR

Em primeiro lugar, apresenta-se a descrição visual das experiências de DTR obtidas na atividade laboratorial e na simulação executada. De modo a obter uma visualização do escoamento para as simulações efetuadas, no programa CFD Post[®], criou-se uma *isosurface* que permitiu seguir o escoamento do *tracer* com concentração adimensional de 0,5. A Tabela 12 apresenta a evolução da experiência ao longo do tempo para o Foto-Reator FluHelik e a Tabela 13 para o Foto-Reator Jatos.

Tabela 12. Evolução da experiência de injeção de tracer ao longo do tempo, em regime laminar no Foto-Reator FluHelik.



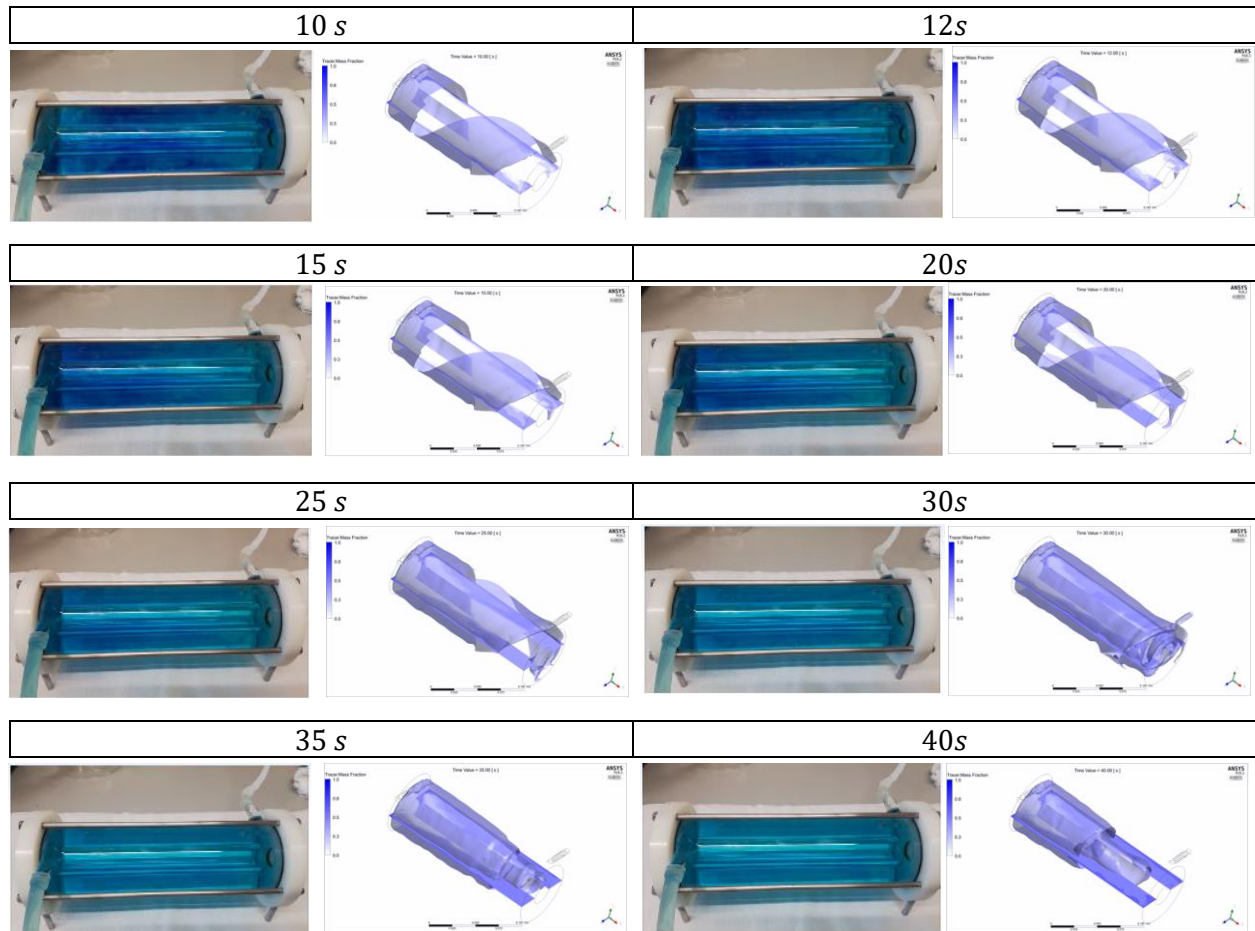
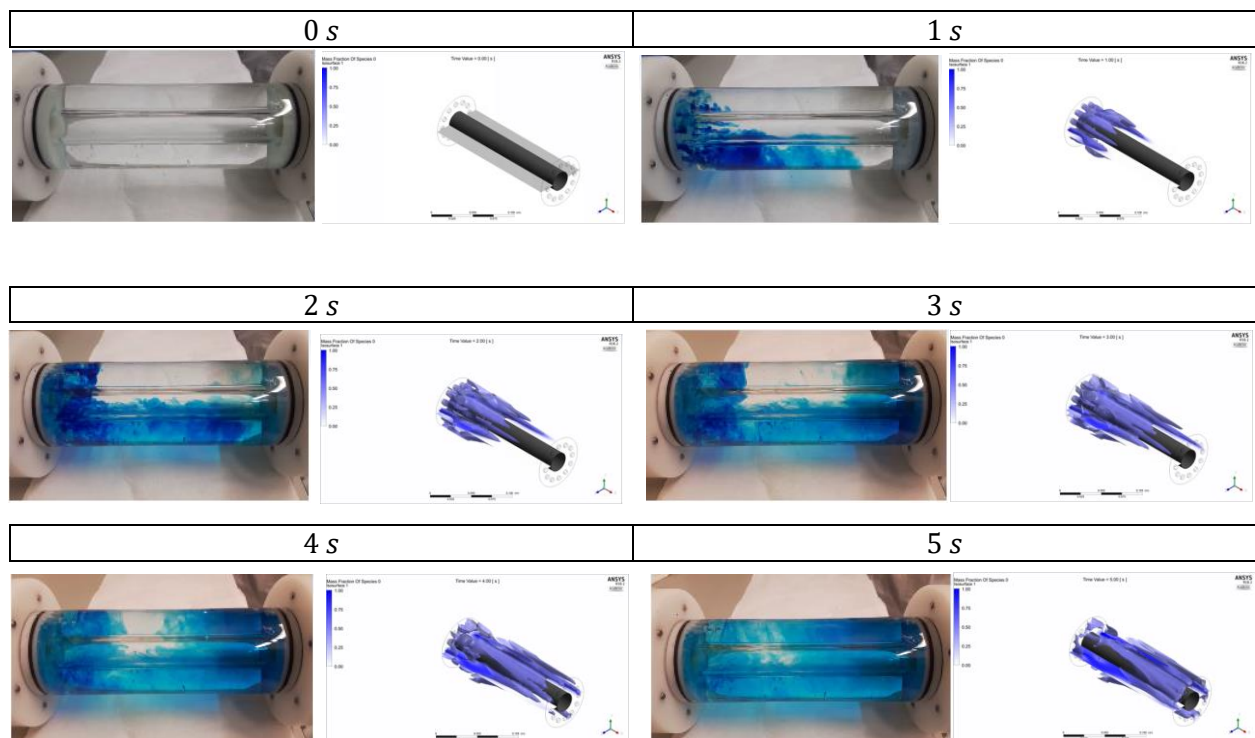
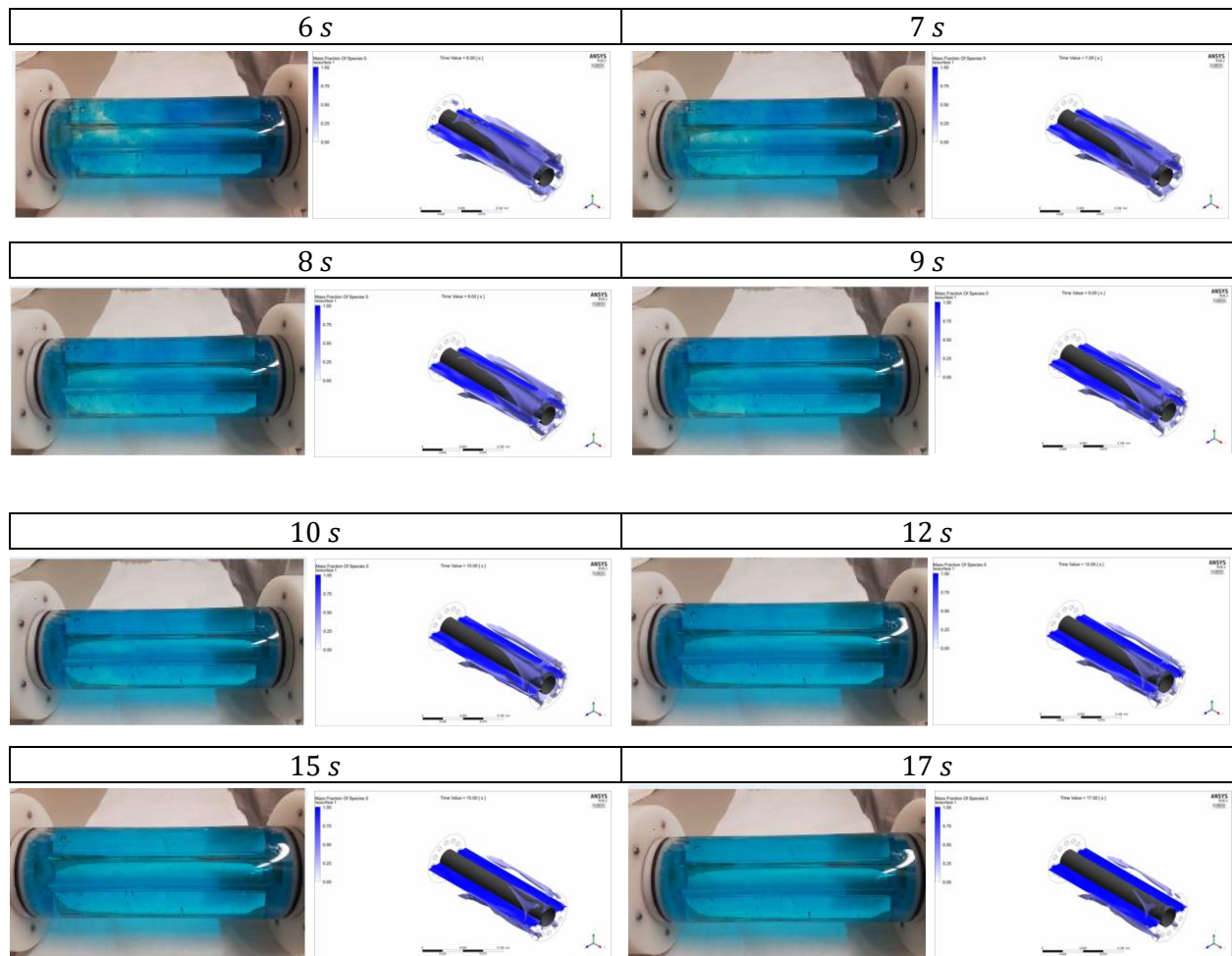


Tabela 13. Evolução da experiência de injeção de tracer ao longo do tempo, em regime laminar no Foto-Reator Jatos.





Através da análise visual obtida, admite-se que o escoamento para o foto-reator FluHelik se processa de forma semelhante na simulação e na realidade, obtendo-se em ambos os casos um movimento helicoidal em torno da manga de quartzo. Já no caso do foto-reator de Jatos convencional a simulação não representa a realidade experimental, uma vez que o escoamento real difere do escoamento simulado, devido à consideração da distribuição equitativa do caudal de entrada.

Seguidamente, apresenta-se a Tabela 14 que sumaria os resultados obtidos para a DTR nos diferentes foto-reatores.

Tabela 14. Parâmetros da DTR do modelo computacional e experimental.

Reator	Modelo de turbulência	τ (s)	$\bar{t}_r$ (s)	σ^2	$\frac{\bar{t}_r}{\tau}$	% V_m	% Q_c
FluHelik	Laminar	48,3	48,1	3043,2	0,996	0,4	-
	Turbulento $k - \varepsilon$	2,2	2,2	3,3	1,000	1,1	-
	Experimental	50	55	-	1,100	-	10

Jatos	Laminar	36,9	9,4	58,1	0,255	74,5	-
	Turbulento $k - \varepsilon$	1,7	0,43	0,02	0,253	74,5	-
	Experimental	38	43	-	1,132	-	10

No caso do Foto-Reator FluHelik, em regime laminar, o valor de $\bar{t}_r$ previsto por CFD foi de 48,1 s e de 55 s calculado pela DTR experimental, respetivamente. Esta diferença pode ser, razoavelmente, atribuída ao erro experimental associado aos volumes de tubo morto na configuração do FluHelik. Embora o reator esteja a ser operado teoricamente sob regime de fluxo laminar, o curto comprimento do reator e a turbulência gerada na entrada do reator asseguram boas condições de mistura. Além disso, o fluxo não é totalmente desenvolvido através do reator.

No caso do Foto-Reator Jatos, em regime laminar, o valor de $\bar{t}_r$ obtido na simulação foi de 9,4 s e de 43 s calculado pela DTR experimental, respetivamente. Esta diferença é significativa e deve-se ao facto de se considerar na simulação que o caudal se distribui igualmente pelas 12 entradas.

As simulações em regime turbulento indicam que, quanto maior a velocidade de entrada, mais o escoamento se aproxima do ideal. Contudo, no caso do reator Jatos, o $\bar{t}_r$ no reator é muito menor do que o tempo de passagem (τ), porque:

- (i) O escoamento não é feito em estado estacionário, embora se tenha assumido que o escoamento era estacionário.
- (ii) Existem volumes estagnados no reator: uma fração de volume do reator tem acesso dificultado à mistura.

Deste modo, verifica-se que a configuração geométrica do foto-reator FluHelik, que inclui entrada e saída tangenciais, permite um escoamento mais favorável para o tratamento de efluentes por processos baseados em radiação UV.

4.2 Simulação da Radiação

Seguidamente, realizou-se uma simulação térmica e de radiação independente para o foto-reator FluHelik, tendo-se obtido os resultados da distribuição de temperaturas e radiação incidente no interior do reator.

4.2.1 Lâmpada

Em primeiro lugar, modelou-se a lâmpada UV, considerando a lâmpada utilizada na instalação experimental, Philips TUV G6T5 com 6 W de potência (1,7 W de potência para a radiação UVC).

Deste modo, obteve uma potência útil da lâmpada de 3,3 W, correspondente à emissão de radiação na região do Infravermelho. Assumindo-se uma lâmpada de comprimento de 186 mm e diâmetro de 23 mm, determinou-se que a geração de calor provocada pela lâmpada é $4,92 \times 10^3 \text{ W m}^{-3}$ e que o fluxo energético da radiação UV é $126,5 \text{ Wm}^{-2}$. Considerou-se ainda que a parede da manga de quartzo se encontrava à temperatura ambiente (20°C).

4.2.2 Mapa de Temperatura

Em seguida, é apresentada a distribuição da temperatura no interior do foto-reator FluHelik, pela Figura 24.

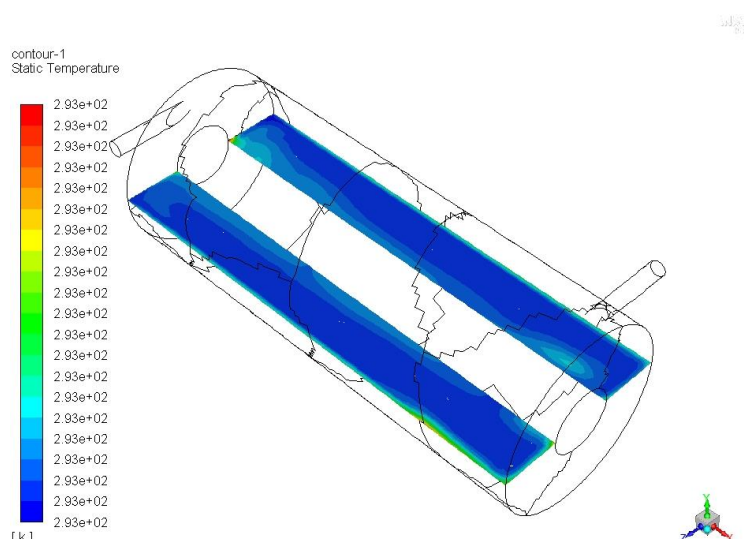


Figura 24. Mapa da Distribuição de Temperaturas no interior do Foto-Reator FluHelik, segundo o plano XZ.

No interior do reator, não há variação significativa da temperatura, devido à baixa potência da lâmpada (3,3 W), tendo em conta as propriedades e o caudal da água.

$$\dot{Q} = \dot{m}C_p\Delta T \quad (4.3)$$

Onde $\dot{Q}$ é o fluxo energético, $\dot{m}$ é o caudal mássico de entrada, C_p é a capacidade calorífica da água e ΔT é a variação da temperatura.

No entanto, verifica-se através do mapa de cores que a temperatura é mais alta próximo da manga de quartzo, devido à proximidade da lâmpada, havendo uma maior concentração de radiação nessa região.

4.2.3 Distribuição da Radiação

Para se analisar a distribuição de radiação no interior, obteve-se, diretamente, no FLUENT®, os mapas da radiação incidente.

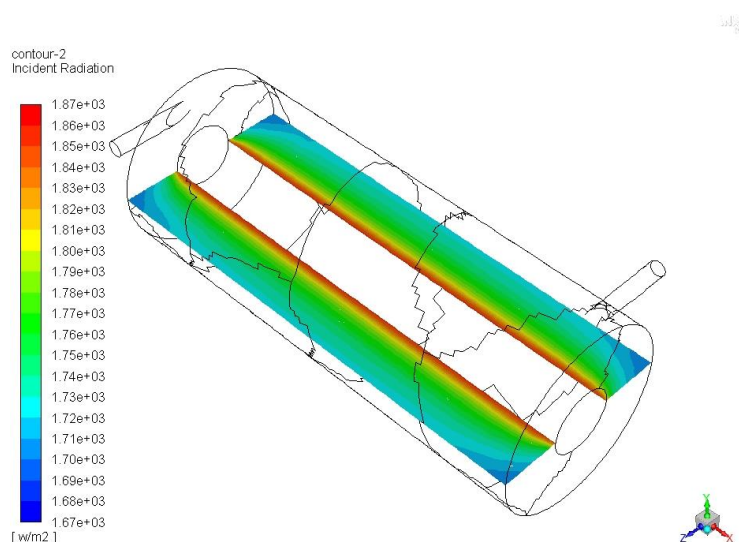


Figura 25. Mapa da Distribuição da Radiação no interior do Foto-Reator FluHelik, segundo o plano XZ.

O mapa de radiação incidente no interior do reator FluHelik indica que a radiação incidente tem maior intensidade nas regiões próximas da manga de quartzo e menor intensidade na carcaça do reator. É de esperar esta mesma distribuição para a configuração do foto-reator Jatos, já que em estudos anteriores se determinou que os campos de radiação são muito similares. Isto indica que a exposição do efluente à radiação está sobretudo dependente dos padrões de escoamento e grau de mistura no interior do reator.

4.3 Intensidade de Turbulência

Para se verificar o efeito da turbulência no escoamento do foto-reatores, realizou-se uma simulação independente, com um número de Reynolds suficientemente elevado para garantir o escoamento turbulento.

Tabela 15. Dados da simulação turbulenta.

	Jatos	FluHelik
Re	$3,59 \times 10^3$	$4,0 \times 10^3$
$u_{inlet} (m s^{-1})$	3,60	11
$I_{inlet} (\%)$	5	5
$D_h (mm)$	3	6

Onde D_h é o diâmetro hidráulico e corresponde à dimensão do tubo de entrada.

Na Figura 26 e 27 compara-se a intensidade turbulenta gerada no interior das duas configurações em estudo, tendo-se para o efeito fixado as mesmas condições de turbulência à entrada do reator.

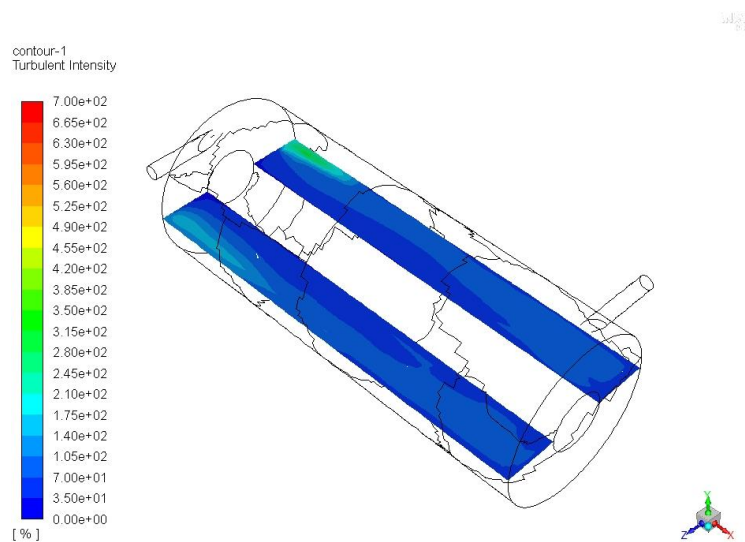


Figura 26. Mapa da intensidade de turbulência no foto-reator FluHelik.

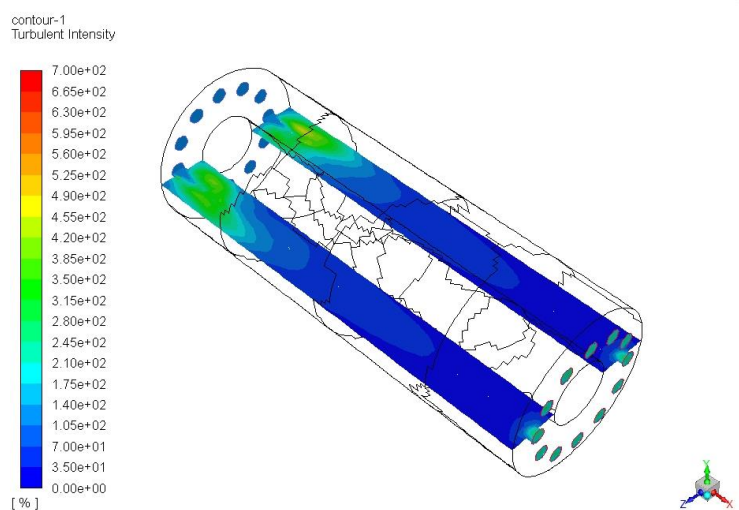


Figura 27. Mapa da intensidade de turbulência no foto-reator Jatos.

Verifica-se que a intensidade turbulenta no reator FluHelik é superior à intensidade turbulenta no reator Jatos. Assim, a geometria do FluHelik é a que maximiza a turbulência do fluido promovendo a mistura do fluido e o contacto com os fotões.

5 Conclusões

Em conclusão, o foto-reator FluHelik apresenta propriedades que podem favorecer as reações fotoquímicas e conduzir a uma maior eficiência no tratamento de efluentes comparativamente com o reator de Jatos convencional.

O funcionamento do foto-reator FluHelik laboratorial simulado ($Q = 50 \text{ L h}^{-1}$) apresenta um escoamento helicoidal em torno da fonte de radiação UVC, apesar de apresentar um baixo número de Reynolds. Isto indica que este foto-reator maximiza a turbulência e aumenta o grau de mistura no interior do reator, promovendo um maior tempo de contacto entre os fotões e o efluente.

O modelo computacional do foto-reator FluHelik representou adequadamente as curvas de distribuição da DTR, geradas a partir do estado estacionário. Já o modelo computacional do foto-reator Jatos visto não ter em conta a distribuição não equitativa do caudal de entrada, resultou numa DTR significativamente diferente da conseguida laboratorialmente. Contudo, de acordo com os resultados obtidos, verifica-se um comportamento hidrodinâmico mais favorável no reator FluHelik, já que este apresenta um maior tempo de residência.

Desta forma, a configuração geométrica do foto-reator FluHelik, sendo um reator tubular com entrada e saída tangenciais, será mais eficiente no tratamento de efluentes, recorrendo a processos de oxidação avançados baseados na utilização de radiação UV.

Referências

1. Hofman-Caris, R. C. H. M. *et al.* Prediction of advanced oxidation performance in various pilot UV/H₂O₂ reactor systems with MP- and LP- and DBD-UV lamps. *Chem. Eng. J.* **210**, 520-528 (2012).
2. Sozzi, D. A. & Taghipour, F. UV reactor performance modeling by Eulerian and Lagrangian methods. *Environ. Sci. Technol.* **40**, 1609-1615 (2006).
3. Peres, J. Análise De Um Reator Fotoquímico Anular Usando a Fluidodinâmica. (2013).
4. Fioreze, M., Santos, E. P. dos & Schmachtenberg, N. Processos Oxidativos Avançados: Fundamentos E Aplicação Ambiental. *Rev. Eletrônica em Gestão, Educ. e Tecnol. Ambient.* **18**, 79-91 (2014).
5. Wols, B. A., Hofman, J. A. M. H., Beerendonk, E. F., Uijttwall, W. S. J. & Dijk, J. C. A Systematic Approach for the Design of UV Reactors Using Computational Fluid Dynamics. *VTT Publ.* **57**, 3-194 (2011).
6. Dewil, R., Mantzavinos, D., Poullos, I. & Rodrigo, M. A. New perspectives for Advanced Oxidation Processes. *J. Environ. Manage.* **195**, 93-99 (2017).
7. Wols, B. A. *CFD in drinking water treatment*. (2010). doi:10.4233/uuid:b1d4405e-a364-4105-ab03-21800b46df5b
8. Mohajerani, M., Mehrvar, M. & Ein-mozaffari, F. Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Photochemical Reactors. *Appl. Comput. Fluid Dyn.* 155-176 (2012).
9. Pareek, V., Cox, S. & Adesina, A. Light Intensity Distribution in Photocatalytic Reactors. *Third Int. Conf. CFD Miner. Process Ind.* **M**, 229-234 (2003).
10. Brancher, M. & Sanitária, E. Fotocatálise Heterogênea E Sua Aplicação Em Superfícies Auto-Limpantes. (2008).
11. Coenen, T. *et al.* Modeling and geometry optimization of photochemical reactors: Single- and multi-lamp reactors for UV-H₂O₂AOP systems. *Chem. Eng. Sci.* **96**, 174-189 (2013).
12. Oturan, M. A. & Aaron, J. J. Advanced oxidation processes in water/wastewater treatment: Principles and applications. A review. *Crit. Rev. Environ. Sci. Technol.* **44**, 2577-2641 (2014).
13. Ground, A. P. Ultraviolet (UV) Disinfection in Drinking Water Treatment. 2-3 (1887).
14. Dai, T., Vrahas, M. S., Murray, C. K. & Hamblin, M. R. Ultraviolet C irradiation: An alternative antimicrobial approach to localized infections? *Expert Rev. Anti. Infect. Ther.* **10**, 185-195 (2012).

15. Nöel, T. *Photochemical Processes in Continuous-Flow Reactors*.
16. Xu, C., Zhao, X. S. & Rangaiah, G. P. Performance analysis of ultraviolet water disinfection reactors using computational fluid dynamics simulation. *Chem. Eng. J.* **221**, 398-406 (2013).
17. Wright, N. & Hargreaves, D. The use of CFD in the evaluation of UV treatment systems. *J. Hydroinformatics* 59-70 (2001).
18. Peres, J. C. G., de Silvio, U., Teixeira, A. C. S. C., Guardani, R. & dos S. Vianna, A. Study of an Annular Photoreactor with Tangential Inlet and Outlet: I. Fluid Dynamics. *Chem. Eng. Technol.* **38**, 311-318 (2015).
19. Elyasi, S. & Taghipour, F. Simulation of UV photoreactor for water disinfection in Eulerian framework. *Chem. Eng. Sci.* **61**, 4741-4749 (2006).
20. ANSYS Fluent Theory Guide. *Ansys Inc* **18.2**, (2017).
21. Schuster, J. J. Estudo da Transição Laminar-Turbulenta utilizando CFD. 1-99 (2015).
22. Anderson, J. D. Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications. *Comput. Fluid Dyn.* 15-51 (2009). doi:10.1007/978-3-540-85056-4
23. Tu, J., Yeoh, G.-H. & Liu, C. Computacional Fluid Dynamics - A Practical Approach. **V**, (2013).
24. Momentive Performance Materials Quartz Inc. Fused Quartz Properties & Usage Guide. (1996).
25. Edwards, O. J. Optical absorption coefficients of fused silica in the wavelength range 0.17 to 3.5 microns from room temperature to 980 deg C. (2018).
26. Bagheri, M. & Mohseni, M. Computational fluid dynamics (CFD) modeling of VUV/UV photoreactors for water treatment. *Chem. Eng. J.* **256**, 51-60 (2014).
27. Casado, C., Marugán, J., Timmers, R., Muñoz, M. & van Grieken, R. Comprehensive multiphysics modeling of photocatalytic processes by computational fluid dynamics based on intrinsic kinetic parameters determined in a differential photoreactor. *Chem. Eng. J.* **310**, 368-380 (2017).

