

ANÁLISE TEÓRICA DE FOTOREATORES UTILIZANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA INTEGRAL GENERALIZADA

Geralda Gilvania cavalnante de Lima

Carlos Antonio Pereira de Lima

Fernando Fernandes Vieira

Universidade Estadual da Paraíba – Departamento de Química - Laboratório de Saneamento Ambiental – Campina Grande – Paraíba. gilvania@uepb.rpp.br

Carlos Antônio Cabral dos Santos

Universidade Federal da Paraíba - Laboratório de Energia Solar – João Pessoa – Paraíba
cabral@ufpb.les.br

Resumo. A contaminação do meio ambiente tem sido apontada como um dos grandes problemas da sociedade moderna. Grande parte desta contaminação pode ser atribuída principalmente as atividades industriais. O processo fotocatalítico apresenta excelentes resultados, possui várias aplicações para destruição de poluentes em meios aquosos. Como consequência, o escoamento incomprimível laminar em desenvolvimento hidrodinâmico, no interior de um reator fotocatalítico, do tipo placas paralelas, operando em regime permanente é modelado, resolvendo as equações de Navier-Stokes, Poisson com formulação em termos de variáveis primitivas, empregando o método híbrido analítico-numérico conhecido como Técnica da Transformada Integral Generalizada (G.I.T.T.), para a determinação do perfil hidrodinâmico. A solução em termos de variáveis primitivas associada à forma explícita do campo de pressão, possibilita o uso de problemas de autovalor de segunda ordem, diferente da formulação em termos de função corrente que utiliza um problema de quarta ordem. Este problema de autovalor facilita a solução dos problemas em diferentes coordenadas. Assim, resultados numéricos para diferentes números de Reynolds são obtidos, ilustrando as características de convergência do método utilizado e permitindo comparações com resultados existentes na literatura, permitindo um melhor entendimento da influência de certos parâmetros que afetam o desempenho de um reator fotocatalítico.

Palavras-chave: Transformada Integral, Fotocatálise, Fotoreatores, Navier-Stokes

1. INTRODUÇÃO

O crescimento descontrolado das grandes cidades vem acelerando o processo de lançamento de esgotos em rios, lagos e águas costeiras. A utilização de pesticidas e fertilizantes na agricultura também produz efluentes (subprodutos tóxicos) que contaminam o solo, e de alguma forma, alcançam o ambiente aquático. Porém, é a atividade industrial a principal responsável pelo lançamento de poluentes não biodegradáveis nesse ambiente.

A degradação fotocatalítica é conseguida com o auxílio de um fotocatalisador, no caso um semicondutor, e uma fonte de radiação. Alguns semicondutores possuem a capacidade de transformar luz em outro tipo de energia. Quando o semicondutor suspenso em uma solução absorve energia na faixa do seu “bandgap” (energia UV), um elétron (e^-) da banda de valência (BV) é transferido para a banda de condução (BC), resultando na criação de lacunas (h^+) na banda de valência, produzindo radicais altamente reativos (Goswami, 1997). Estes radicais são do tipo

hidroxila ($\bullet\text{OH}$) e podem oxidar e mineralizar compostos orgânicos. As moléculas orgânicas são decompostas e transformadas em água, dióxido de carbono e ácidos minerais, conforme equações abaixo (Alberici, 1992).

Uma grande variedade de reatores photocatalíticos vem sendo estudada e desenvolvida para aplicações específicas na destruição de poluentes. O sistema de engenharia e metodologia de projetos em escala industrial ainda é muito pouco explorado. Poucos trabalhos de simulação foram realizados para a determinação de perfis hidrodinâmico, de concentração e de radiação. A correta simulação do problema físico é considerada como uma importante ferramenta no projeto de reatores photocatalíticos e equipamentos.

Ao contrário do que possa parecer, projetar um sistema de desintoxicação photocatalítico solar é bastante complexo, pois muitas variáveis interferem diretamente no processo como: seleção do reator, configuração (série ou paralelo), modo operacional (suspensão ou matriz fixa), intensidade de radiação, carga do catalisador, velocidade de fluxo, fator de atrito, controle do pH, entre outros. A área necessária para que ocorra o processo photocatalítico é determinada levando em consideração todos estes fatores (Lima et al., 2000).

O objetivo do presente trabalho é um estudo teórico da determinação do perfil hidrodinâmico de um reator photocatalítico, na forma de um canal de placas paralelas. A simulação numérica é baseada na solução das equações de Navier-Stokes e Poisson em termos de variáveis primitivas pelo uso da G.I.T.T. Tal objetivo é baseado na escassez de trabalhos enfocando a modelagem e simulação de reatores photocatalíticos, aliado ao desenvolvimento gradual da G.I.T.T. na solução de problemas de mecânica dos fluidos, oferecendo soluções para casos cada vez mais complexos. Permitindo, portanto, um melhor entendimento da influência de certos parâmetros que afetam o desempenho de um reator photocatalítico, auxiliando no projeto de novas unidades ou otimização das já existentes.

A G.I.T.T. proporciona soluções híbridas numérico-analíticas para problemas de convecção-difusão cuja transformação integral resulta em sistemas de equações diferenciais ordinárias acopladas, ou cujos problemas auxiliares são complexos do ponto de vista computacional. O trabalho mais completo e sistemático sobre a G.I.T.T. foi feito por Cotta (1993a), mas revisões do progresso da técnica encontram-se em Cotta (1992), Mikhailov e Cotta (1992), Cotta (1993b), Cotta e Mikhailov (1993), Cotta (1994).

2. DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Para se determinar a área necessária em que possa ocorrer o processo photocatalítico é necessário determinar a velocidade de fluxo e o fator de atrito. Para isto, considera-se o problema do desenvolvimento simultâneo do campo de velocidade, em um reator photocatalítico, com geometria de um canal de placas paralelas, operando em regime permanente, no qual as condições de contorno são especificadas na entrada e saída do mesmo, conforme mostrado abaixo.

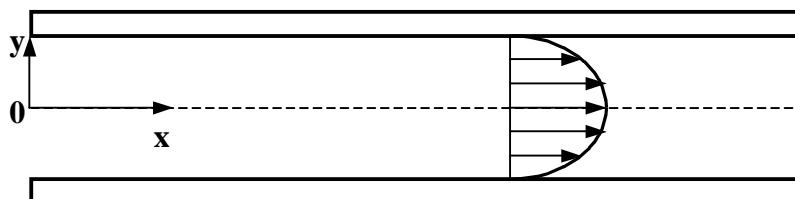


Figura1. Reator photocatalítico

A formulação matemática do problema físico é obtida a partir das seguintes hipóteses restritivas: escoamento incompressível, impermeabilidade e não-deslizamento nas paredes do duto, fluido newtoniano, dissipação viscosa desprezível e propriedades físicas constantes.

Para a solução do problema hidrodinâmico, o escoamento dentro do reator photocatalítico do tipo canal de placas paralelas é governado pelas equações da Continuidade, Navier-Stokes, Poisson usando a formulação de variáveis primitivas que são descritas a seguir, na forma adimensionalizada:

$$x = \frac{x^*}{b} \quad , \quad y = \frac{y^*}{b} \quad u = \frac{u^{**}}{u_\infty} \quad v = \frac{v^*}{u_\infty} \quad P = \frac{p^{**} - p_0}{\rho u_0^2} \quad \text{Re} = \frac{u_0 b}{\nu} \quad (1.a,b,c,d,f)$$

Observando-se que * e ** identifica as variáveis dimensionais e o número de Reynolds, definido com base na velocidade na entrada do reator. As equações abaixo são válidas no domínio $0 < y < 1$, $x > 0$.

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

$$u(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial x} + v(x, y) \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = - \frac{\partial P(x, y)}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 P(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P(x, y)}{\partial y^2} = 2 \left[\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} \frac{\partial v(x, y)}{\partial y} - \frac{\partial v(x, y)}{\partial x} \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} \right] \quad (4)$$

Com as seguintes condições de Contorno:

$$u(0, y) = 1 \quad ; \quad P(0, y) = 0 \quad (5 a,b)$$

$$u(\infty, y) = u_\infty \quad ; \quad v(\infty, y) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial P}{\partial x}(\infty, y) = - \frac{3}{\text{Re}} \quad (6 a,b,c)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x, 0) = 0 \quad ; \quad v(x, 0) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial P}{\partial y}(x, 0) = 0 \quad (7.a,b,c)$$

$$u(x, 1) = 0 \quad ; \quad v(x, 1) = 0 \quad ; \quad \frac{\partial P}{\partial y}(x, 1) = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \Big|_{y=1} \quad (8.a,b,c)$$

Para a apropriada aplicação da G.I.T.T. e melhorar sua performance computacional é conveniente fazer uma homogeneização das condições de contorno. Para este fim, será feita a separação das velocidades, em velocidade do campo em desenvolvimento, que é função de x e y , e velocidade do campo desenvolvido, função apenas de y .

$$u(x, y) = u_\infty(y) + u^*(x, y) \quad ; \quad u_\infty(y) = \frac{3}{2} (1 - y^2) \quad (9 a,b)$$

Um filtro para a pressão se faz necessário para fazer uma homogeneização das condições de contorno. Portanto, a solução para pressão é dada da seguinte maneira:

$$P(x, y) = P^*(x, y) + P_F(x, y) \quad (10)$$

Onde P_F é um filtro, obtido através da aplicação da equação de quantidade de movimento em $y=1$:

Na forma adimensionalizada e integrada, temos:

$$P_F = P_0 + \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial v}{\partial y} \quad \text{ou} \quad P_F = P_0 - \frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial u}{\partial x} \quad (11 a,b)$$

Condições de contorno para o filtro:

$$x = 0 \rightarrow P_F = P_0 \quad x = L_H \rightarrow \frac{dP_F}{dx} = 0 \quad (12.a,b)$$

$$y = 0 \rightarrow \frac{\partial P_F}{\partial y} = -\frac{1}{Re} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = 0 \quad y = 1 \rightarrow \left. \frac{\partial P_F}{\partial y} \right|_{y=1} = \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \quad (13.a,b)$$

As equações (3) a (4), juntamente com as condições de contorno, devem ser escritas de modo a incluir a separação de velocidades (9) e o filtro de pressão (10) e (11), resultando:

$$(u^* + u_\infty) \frac{\partial u^*}{\partial x} + v \left(\frac{\partial u^*}{\partial y} + \frac{du_\infty}{dy} \right) = -\frac{\partial(P^* + P_F)}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u^*}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^2} + \frac{d^2 u_\infty}{dy^2} \right) \quad (14)$$

$$\frac{\partial^2(P^* + P_F)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(P^* + P_F)}{\partial y^2} = 2 \left[\frac{\partial u^*}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \left(\frac{\partial u^*}{\partial y} + \frac{du_\infty}{dy} \right) \right] \quad (15)$$

$$u^*(0, y) = 1 - u_\infty(y) ; \quad P^*(0, y) = 0 \quad (16 \text{ a,b})$$

$$u^*(\infty, y) = 0 ; \quad v(\infty, y) = 0 ; \quad \frac{\partial P^*}{\partial x}(\infty, y) = -\frac{3}{Re} \quad (17 \text{ a,b,c})$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial y}(x, 0) = 0 ; \quad v(x, 0) = 0 ; \quad \frac{\partial P^*}{\partial y}(x, 0) = 0 \quad (18 \text{ a,b,c})$$

$$u^*(x, 1) = 0 ; \quad v(x, 1) = 0 ; \quad \frac{\partial P^*}{\partial y}(x, 1) = 0 \quad (19 \text{ a,b,c})$$

Problema Auxiliar para o Campo de Velocidade, com as condições de contorno:

$$\frac{d^2 \tilde{\phi}_i(y)}{dy^2} + \mu_i^2 \tilde{\phi}_i(y) = 0 ; \quad \left. \frac{\partial \tilde{\phi}_i}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 ; \quad \tilde{\phi}_i(1) = 0 \quad (20.a,b,c)$$

Os autovalores, autofunções e a norma são dados respectivamente por:

$$\mu_i = (2i-1)\frac{\pi}{2} ; \quad \tilde{\phi}_i(y) = \cos(\tilde{\phi}_i y) ; \quad N_i = \int_0^1 \tilde{\phi}_i(y) dy = \frac{1}{2} ; \quad i = 1, 2, \dots \quad (22 \text{ a,b,c,d})$$

Problema Auxiliar para o Campo de Pressão e suas condições de contorno:

$$\frac{d^2 \tilde{\psi}_i(y)}{dy^2} + \beta_i^2 \tilde{\psi}_i(y) = 0 ; \quad \left. \frac{\partial \tilde{\psi}_i}{\partial y} \right|_{y=0} = 0 ; \quad \left. \frac{\partial \tilde{\psi}_i}{\partial y} \right|_{y=1} = 0 \quad (23 \text{ a,b,c})$$

A autofunção, ao autovalores e a norma tem as seguintes formas e apresentam ortogonalidade:

$$\tilde{\psi}_i(y) = \cos(\beta_i \cdot y) \quad (24)$$

$$i=1 \rightarrow \beta_i = 0 \quad i > 1 \rightarrow \beta_i = (i-1)\pi \quad (25 \text{ a,b})$$

$$i=1 \rightarrow N_0 = 1 \quad i > 1 \rightarrow N_i = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(y) dy = \frac{1}{2} \quad i = 1, 2, \dots \quad (26 \text{ a,b,c})$$

$$\frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) \tilde{\phi}_j(\mu_j, y) dy = \delta_{ij} \quad \delta_{ij} = 0 \quad \text{se } i \neq j \quad (27 \text{ a,b})$$

$$\frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\mu_i, y) \tilde{\psi}_j(\mu_j, y) dy = \delta_{ij} \quad \delta_{ij} = 1 \quad \text{se } i = j \quad (27 \text{ c,d})$$

Pares Transformada Inversa

$$u^*(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\phi}_i(i, y) \bar{u}_i^*(x) \quad (\text{inversa}) \quad \bar{u}_i^* = \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) u^*(x, y) dy \quad (\text{transformada}) \quad (28 \text{ a,b})$$

$$P^*(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(\mu_i, y) \bar{P}_i^*(x) \quad (\text{inversa}) \quad \bar{P}_i^* = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\mu_i, y) P^*(x, y) dy \quad (\text{transformada}) \quad (29 \text{ a,b})$$

A velocidade Média pode ser calculada analiticamente pela integração do perfil de velocidade e do uso da inversa, resultando:

$$\bar{U}_m = \sum_{i=1}^{\infty} F_i(0) \bar{u}_i^* + 1 \quad \text{Onde: } F_i(0) = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}}} \int_0^1 \phi_i(y) dy \quad (30 \text{ a,b})$$

Para eliminar a dependência espacial da velocidade transversal, a equação da continuidade será integrada e nela aplicada a inversa, obtendo-se:

$$v(x, y) = \int_y^1 \frac{\partial \bar{u}_i^*}{\partial x} dy \quad ; \quad v(x, y) = \sum_{i=1}^{\infty} \bar{F}_i(y) \frac{d\bar{u}_i^*}{dx} \quad ; \quad \bar{F}_i(y) = \int_y^1 \tilde{\phi}_i(y) dy \quad (31 \text{ a,b,c})$$

Transformação Integral do Problema

O processo de transformação integral das equações diferenciais parciais num sistema diferencial ordinário, é feito fazendo uso do operador $\int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) dy$ no campo da velocidade, bem como o operador $\int_0^1 \tilde{\psi}_i(\beta_i, y) dy$, no campo da pressão, em seguida usando as inversas e aplicando as propriedades de ortogonalidade, obtém-se um sistema diferencial ordinário, que deve ser resolvido a partir de procedimentos numéricos, devido à impossibilidade de se obter soluções analíticas. No entanto, torna-se computacionalmente inviável obter resultados para os potenciais transformados para um número infinito de termos da série. A técnica da G.I.T.T. possui como característica importante do método, a garantia de convergência das soluções, para ordem crescente de truncamento das séries-solução. Para este caso, os sistemas infinitos foram representados por série finitas, com uma ordem de truncamento NU para o potencial auxiliar da velocidade, NP para a

pressão e NC para a concentração; podendo NU , NP e NC serem diferentes para cada expansão, dependendo da taxa de convergência de cada potencial, resultando:

Desta maneira, o problema diferencial parcial foi transformado num sistema de equações ordinárias não lineares, com condições de contorno em dois pontos.

O sistema diferencial ordinário resultante da formulação em estudo deve ser resolvido a partir de procedimentos numéricos, devido à impossibilidade de se obter soluções analíticas. No entanto, torna-se computacionalmente inviável obter resultados para os potenciais transformados para um número infinito de termos da série. A técnica da G.I.T.T. possui como característica importante do método, a garantia de convergência das soluções, para ordem crescente de truncamento das séries-solução. Para este caso, os sistemas infinitos foram representados por série finitas, com uma ordem de truncamento NU para o potencial auxiliar da velocidade, NP para a pressão e NC para a concentração; podendo NU , NP e NC serem diferentes para cada expansão, dependendo da taxa de convergência de cada potencial, resultando:

$$\frac{d^2\bar{u}_i^*}{dx^2} = \frac{\text{Re}}{2} \left\{ \sum_{k=1}^{NU} \left[\sum_{j=1}^{NU} AB_{ijk} \bar{u}_j^*(x) + AB_{ik\infty} \right] \frac{d\bar{u}_k^*}{dx} + \sum_{n=1}^{NP} C_{in} \frac{d\bar{P}_n^*}{dx} \right\} + \frac{\mu_i^2 \bar{u}_i^*}{2} - \frac{D_{if}}{2} \quad (32)$$

$$\sum_{N=1}^{NP} P_{mat}(i, n) \frac{d^2\bar{P}_n^*}{dx^2} = \bar{G}_i + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{NU} G_{im} \cdot A_m \quad (33)$$

Onde:

$$\bar{G}_i = \beta_i^2 \bar{p}_i^* + 2 \sum_{j=1}^{NU} \sum_{k=1}^{NU} E_{ijk} \frac{d\bar{u}_j^*}{dx} \frac{d\bar{u}_k^*}{dx} - 2 \sum_{k=1}^{NU} \left[\sum_{j=1}^{NU} F_{ijk} \bar{u}_j^* + F_{ik\infty} \right] \frac{d^2\bar{u}_k^*}{dx^2} \quad (34)$$

$$A_m = \sum_{k=1}^{NU} \sum_{j=1}^{NU} AB_{mkf} \frac{d\bar{u}_j^*}{dx} \frac{d\bar{u}_k^*}{dx} + \sum_{k=1}^{NU} \sum_{j=1}^{NU} AB_{mjk} \bar{u}_j^*(x) \frac{d^2\bar{u}_k^*}{dx^2} + \sum_{k=1}^{NU} AB_{mkf} \frac{d^2\bar{u}_k^*}{dx^2} - \frac{1}{\text{Re}} \mu_m^2 \frac{d\bar{u}_m^*}{dx} \quad (35)$$

$$P_{mat}(i, n) = \delta_{in} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{NU} G_{im} \cdot C_{mn} \quad (36)$$

Os coeficientes podem ser calculados analiticamente a partir das integrais:

$$AB_{ijk} = \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) \tilde{\phi}_j(\mu_j, y) \tilde{\phi}_k(\mu_k, y) dy + \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) \tilde{\phi}_j(\mu_j, y) \bar{F}_k(y) dy \quad (37)$$

$$AB_{ik\infty} = \int_0^1 u_\infty \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) \tilde{\phi}_k(\mu_k, y) dy + \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) u_\infty \bar{F}_k(y) dy \quad (38)$$

$$C_{in} = \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) \tilde{\psi}_n(\beta_i, y) dy ; D_{i\infty} = \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) u_\infty dy \quad (39 \text{ a,b})$$

$$F_k(y) = \int_0^1 \tilde{\phi}_k(\mu_k, y) dy ; E_{ijk} = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\beta_i, y) \tilde{\phi}_j(j, y) \bar{F}_k(y) dy \quad (40 \text{ a,b})$$

$$F_{ijk} = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\beta_i, y) \tilde{\phi}_j(j, y) \bar{F}_k(y) dy ; F_{ik\infty} = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\beta_i, y) \bar{F}_k(y) u_\infty dy \quad (41 \text{ a,b})$$

$$G_{im} = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\beta_i, y) \tilde{\phi}_m(\mu_m, y) dy \quad (42)$$

O mesmo procedimento é também aplicado nas condições de contorno:

$$\bar{u}_i^*(0) = \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) dy - \int_0^1 \tilde{\phi}_i(\mu_i, y) u_\infty dy \quad ; \quad \bar{p}_i^*(0) = 0 \quad (43)$$

$$\bar{u}_i^*(\infty) = 0 \quad ; \quad \frac{d\bar{p}_i^*}{dx} = -\frac{3}{Re} \int_0^1 \tilde{\psi}_i(\beta_i, y) dy \quad (44)$$

Como as condições de contorno para a saída do reator estão especificadas no infinito é comum resolver-se o problema numericamente tomando-se várias posições arbitrárias na direção axial x , ao longo do reator, verificando assim a solução obtida com tal truncamento do domínio, até que se consiga satisfazer as condições de contorno de entrada e saída do canal. Para resolver numericamente os sistemas de equações resultantes foi utilizada a subrotina DBVPFD, pertencente ao sistema de bibliotecas **IMSL (1997)**. Esta resolve problemas diferenciais ordinários não lineares, com condições de contorno em dois pontos. Na Tabela 4.1 são mostrados resultados de **Pérez Guerrero (1995)** relativos ao número de Reynolds, baseado no diâmetro hidráulico e resultados de **Wang e Longwell (1964)**, **Mc Donald et al. (1972)** baseados também no número de Reynolds hidráulico. Observa-se que os resultados do presente trabalho, (condição de entrada: $u = 1$, $P=0$) para números de Reynolds crescentes aproximam-se dos resultados de função corrente (**Pérez Guerrero,1995**), para condição de entrada irrotacional ($u = 1$ e $\omega = 0$), como também dos resultados de **Wang e Longwell (1964)**, **Mac Donald et al. (1972)** encontrados a partir da aplicação dos métodos das diferenças finitas e elementos finitos.

Tabela 4.1 - Comparaçāo da componente de velocidade longitudinal no centro do duto.

RE	Referência	x			
		0.2083	0.8333	3.3333	7.5000
75	Presente Trabalho	1.050	1.168	1.334	1.444
300*	Pérez Guerrero (1995)	1.052	1.170	1.337	1.444
300*	Wang e Longwell (1964)	1.058	1.188	1.3572	1.4509
300*	Mac Donald et al. (1972)	1.050	1.170	1.34	1.44
150	Presente trabalho	1.039	1.121	1.243	1.348
600*	Pérez Guerrero (1995)	1.036	1.120	1.242	1.347
300	Presente trabalho	1.026	1.083	1.173	1.252
1200*	Pérez Guerrero(1995)	1.024	1.080	1.170	1.250

* refere-se ao número de Reynolds baseado no diâmetro hidráulico que é equivalente a quatro vezes o número de Reynolds do presente trabalho.

As Tabelas 4.2 e 4.7 ilustram a convergência da velocidade longitudinal no centro do duto ($y = 0$) em várias posições do duto, para diferentes Números de Reynolds.

Tabela 4.2 – Convergência da velocidade no centro do duto, $u(x,0)$, para $Re = 40$

NU=NP	x			
	0.2	0.4	0.6	0.8
5	1.056	1.083	1.119	1.155
10	1.050	1.100	1.146	1.185
15	1.055	1.109	1.156	1.197
20	1.058	1.113	1.162	1.203
25	1.059	1.116	1.166	1.208
30	1.060	1.118	1.169	1.212

35	1.061	1.120	1.171	1.217
40	1.062	1.122	1.173	1.220
45	1.065	1.124	1.177	1.224
50	1.068	1.128	1.180	1.230
55	1.068	1.130	1.184	1.230
60	1.068	1.132	1.184	1.230
65	1.069	1.133	1.184	1.230

Tabela 4.3 – Convergência da velocidade no centro do duto, $u(x,0)$, para $Re = 75$

NU=NP	x			
	0.20833	0.8333	3.3333	7.5
5	1.022	1.101	1.275	1.389
10	1.035	1.131	1.302	1.415
15	1.040	1.141	1.312	1.424
20	1.044	1.147	1.317	1.429
25	1.045	1.151	1.323	1.434
30	1.046	1.155	1.328	1.438
35	1.047	1.157	1.333	1.441
40	1.047	1.159	1.336	1.442
45	1.048	1.162	1.338	1.442
50	1.048	1.164	1.338	1.443
55	1.049	1.166	1.339	1.443
60	1.050	1.166	1.339	1.444
65	1.051	1.168	1.340	1.444
70	1.051	1.168	1.340	1.444

Um estudo das Tabelas 4.2 e 4.3 mostra as características de uma boa convergência para velocidade no centro do reator dentro da tolerância requerida.

Pode ser observado que em regiões próximo à entrada do duto, a convergência é mais lenta e somente é alcançada com 65 termos para velocidade e pressão. A taxa de convergência melhora à medida que se avança ao longo do duto. A função u_∞ , usada como filtro, representa o perfil de velocidade completamente desenvolvido de $u(x,y)$; assim, ao se avançar o escoamento ao longo do reator, a velocidade $u(x,y)$ tende para u_∞ , requerendo-se um número menor de termos na expansão.

Os resultados dos testes para o estudo do efeito do truncamento do domínio infinito são mostrados nas Tabelas 4.8 a 4.12, onde o número de autovalores utilizados para a velocidade e pressão foram 65.

Tabela 4.3- Velocidade na linha de centro do duto, $u(x,0)$, em diversas posições de truncamento do duto para $Re = 40$

x	$L=4$	$L=6$	$L=8$	$L=10$	$L=\infty$
0.2	1.074	1.070	1.069	1.069	1.069
0.4	1.136	1.134	1.133	1.133	1.133
0.6	1.232	1.221	1.184	1.184	1.184
0.8	1.266	1.233	1.230	1.230	1.230
1.0	1.317	1.288	1.260	1.260	1.260
1.4	1.355	1.340	1.313	1.313	1.313
1.8	1.369	1.350	1.351	1.351	1.351
2.0	1.440	1.366	1.364	1.364	1.364
4.0	1.50	1.442	1.440	1.440	1.440

Tabela 4.4 - Velocidade na linha de centro do duto, $u(x,0)$, em diversas posições de truncamento do duto para $Re = 75$

x	$L = 15$	$L = 20$	$L = 45$	$L = 60$	$L = \infty$
0.2333	1.050	1.050	1.050	1.050	1.050
0.8333	1.168	1.168	1.168	1.168	1.168
3.3333	1.340	1.340	1.340	1.340	1.340
7.5000	1.444	1.444	1.444	1.444	1.444
8.3333	1.454	1.454	1.454	1.454	1.454
13.125	1.487	1.487	1.487	1.487	1.487
15.000	1.500	1.498	1.498	1.498	1.498

Comparações entre resultados obtidos a partir das equações de camada limite (**Figueira da Silva, 1994**) e o presente trabalho são mostrados na Figura 4.2.

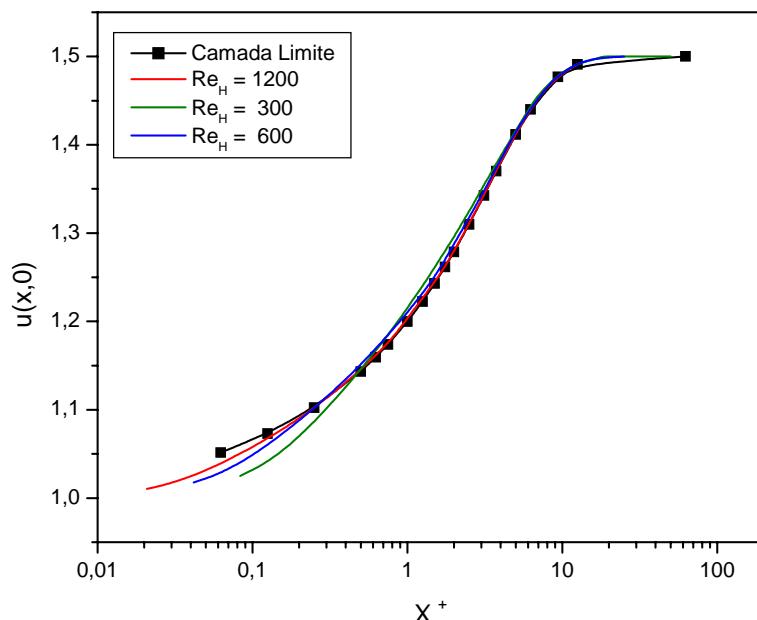


Figura 4.3 – Comparação da componente de velocidade $u(x,0)$ ao longo do canal do presente trabalho com os resultados das equações de camada limite.

Pode ser observado que soluções das equações de Navier-Stokes em termos de variáveis primitivas (presente trabalho) com condição de entrada $u = 1$ e $P = 0$, para números de Reynolds crescentes, apresenta uma boa concordância com os resultados para o caso das soluções por formulação em camada limite, com diferenças mais consideráveis na entrada do canal, o que já era esperado, uma vez que o modelo de camada limite despreza a difusão longitudinal de quantidade de movimento e o gradiente transversal da pressão no duto, que tem influência significativa na entrada.

A figura 4.3 mostra a comparação realizada dos resultados obtidos a partir das equações de Navier-Stokes em termos de variáveis primitivas (presente trabalho) em termos de função corrente (**Pérez Guerrero, 1995**).

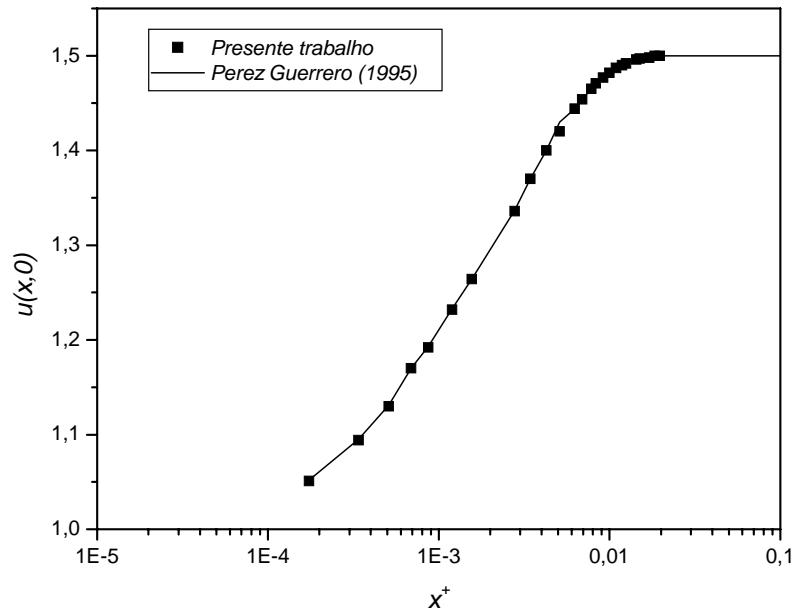


Figura 4.3 – Comparação do perfil de velocidade $u(x,0)$ ao longo do duto para $Re_{H=}$ 300.

Pela Figura 4.3 pode ser visto mais uma vez a concordância dos resultados do presente trabalho com os resultados de (**Pérez Guerrero, 1995**) para condição de entrada $U = 1$ e $\omega = 0$.

A Figura 4.4 apresenta resultados do desenvolvimento do perfil de velocidade $v(x,y)$, para número de Reynolds igual a 75. Pode ser observado, uma crescente atenuação axial e transversal da componente $v(x,y)$, voltando a assumir essa distribuição no escoamento completamente desenvolvido.

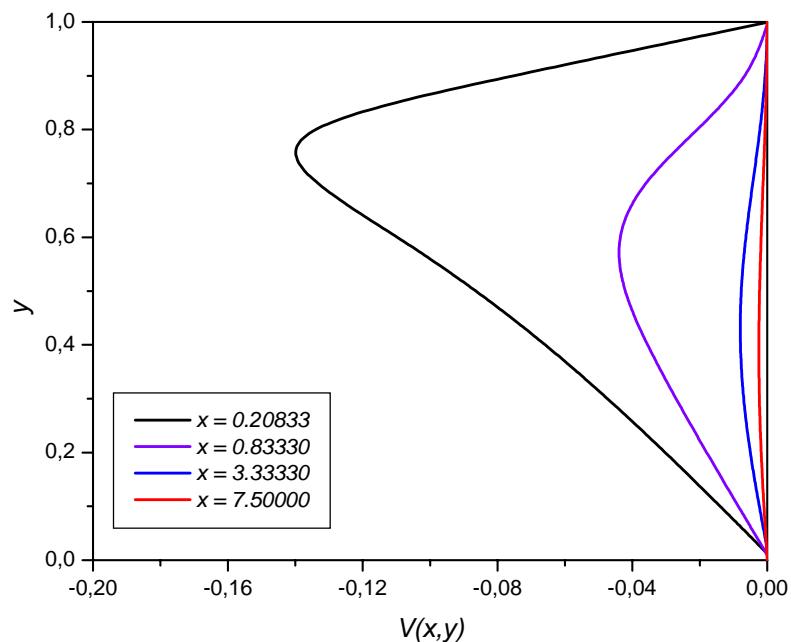


Figura 4.4 – Perfil de velocidade $v(x,y)$ ao longo do duto para $Re = 75$.

A Figura 4.5 mostra uma análise da componente de velocidade $u(x,y)$ em diferentes posições axiais, para o caso de número de Reynolds igual a 75. Os resultados mostram que à medida que vai se avançando ao longo do canal o perfil parabólico vai se formando, característica típica do comportamento completamente desenvolvido.

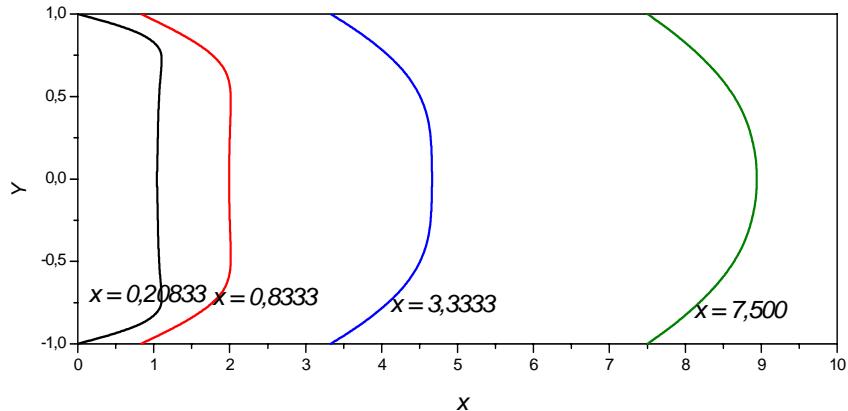


Figura 4.5 – Desenvolvimento do perfil de velocidade para $Re = 75$.

3. CONCLUSÕES

Os resultados apresentados e discutidos demonstraram a aplicabilidade da Técnica da Transformada Integral Generalizada, como uma ferramenta capaz de conseguir resultados precisos em problemas de escoamento no interior de reatores photocatalíticos de placas paralelas, envolvendo as equações de Navier-Stokes, equação de Poisson para o campo de pressão.

Além dos diversos tipos de problemas já estudados pelas equações de Navier-Stokes no sistema de coordenadas retangulares, já abordados com sucesso por esta técnica, fica aqui registrado a eficiência da G.I.T.T. também na solução das equações de Navier Stokes via variáveis primitivas. O fato de se ter usado a formulação em termos de variáveis primitivas associada ao campo de pressão, possibilitando o uso de problemas de autovalor de segunda ordem, ao contrário da formulação em termos de função corrente, que utiliza problemas de autovalor de quarta ordem, evidencia a possibilidade de se estender este tipo de formulação para problemas em diferentes coordenadas.

O uso dos filtros na velocidade e na pressão foi bastante adequado, pois além de homogeneizar o contorno, serviu também para acelerar as convergências.

Foi verificado que os resultados da resolução das equações de Navier-Stokes em termos de variáveis primitivas com condição de entrada $u = 1$ e $P = 0$ se aproximam dos resultados em termos de função corrente com a condição de entrada $u = 1$ e $\omega = 0$, com diferenças para valores de Reynolds baixos.

Foi observado que os resultados para números de Reynolds crescentes, apresenta boa concordância com os resultados da formulação de camada limite, com diferenças mais acentuadas na entrada do reator, isto porque nesta última formulação se despreza os termos da difusão longitudinal e o gradiente de pressão, os quais tem grande influência na região de entrada.

4. REFERÊNCIAS

Alberici, R.M., 1992, "Fotodegradação de Fenol e Fenóis Clorados Catalisada por Dióxido de Titânio", Dissertação de Mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, São Paulo, Brasil.

- Cotta, R.M., 1992. "Computational Integral Transform in Computational Approach in Non Linear Diffusion and Convection-Diffusion Problems", Laboratório di Ingegneria Nucleare di Montecuccolino, Série Scientífica LIN-1202, Universitá degli Studi di Bologna, Itália.
- Cotta, R.M., 1993a, "A Review of the Integral Transform Method in Nonlinear Heat and Fluid Flow Problems", Proc. of the 1st. Ibero-American Congress of Mechanical Engineering , Madri, Espanha.
- Cotta, R.M., 1993b, "Integral Transform in Computational Heat and Fluid Flow", C.R.C Press, Boca Raton, FL, EUA.
- Cotta, R.M., 1994, "The Integral Transform Method in Computational Heat and Fluid Flow, Proceedings of the 10th International Heat Transfer Conference, Brington, UK.
- Goswami, D.Y., 1997, "A Review of Engineering Developments of Aqueous Phase Solar Photocatalytic Detofication and Desinfection Processes", Journal of Solar Energy Engineering, Vol. 119, pp. 101-107.
- IMSL Library, 1997, Math/Lib., Houston, TX.
- Lima, G.G.C., Lima, C.A.P., Vieira, F.F., Silva, Z.E. e Santos, C.A.C., 2000, "Estudo e Análise de Reatores Fotocatalíticos" XVI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Anais em Cd-Rom, Uberaba, Brasil.
- McDonald, J.W. Denny, V.E. e Mills, A.F., 1972, "Numerical Solutions of the Navier-Stokes Equations in Inlet Regions", Journal Apply Mechanical, Vol. 39, pp. 873-878.
- Pérez Guerrero, J.S. e Cotta, R.M., 1995, "Integral Transform Solution of Developing Laminar Duct Flow in Navier-Stokes Formulation", International Journal Numerical Methods Fluids, Vol.20, pp. 1203-1213.
- Wang, Y.L. e Longwell, P.A., 1964, "Laminar Flow in the Inlet Section of Parallels Plats", AIChE J, Vol. 10, pp. 323-329.

THEORETICAL ANALYSIS OF FOTOREACTORS USING THE TECHNIQUE OF THE TRANSFORMED INTEGRAL GENERALIZED

Abstract. The contamination of the environment has been pointed as one of the great problems of the modern society. Great part of this contamination can be attributed mainly the industrial activities. The process photocatalytic presents excellent results, it possesses several applications for destruction of pollutant in aqueous means. As consequence, the incompressible drainage to laminate in hydrodynamic development, inside a reactor photocatalytic, of the type parallel plates, operating in permanent regime is modeled, solving the equations of Navier-Stokes, Poisson with formulation in terms of primitive variables, using the analytic-numeric hybrid method known as Technique of the Transformed Integral Generalized (G.I.T.T.), for the determination of the hydrodynamic profile. The solution in terms of primitive variables associated to the explicit form of the pressure field, makes possible the use of problems of eigenvalue of second order, different from the formulation in terms of average function that uses a problem of fourth order. This eigenvalue problem facilitates the solution of the problems in different coordinates. Like this, numeric results for different numbers of Reynolds are obtained, illustrating the characteristics of convergence of the used method and allowing comparisons with existent results in the literature, allowing a better understanding of the influence of certain parameters that you/they affect the acting of a reactor photocatalytic.

Key-words: Transformed Integral, photocatalysis, Photoreactors, Navier-Stokes