UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

BRUNO BATISTA GONÇALVES

**Detalhando a solução unidimensional do método de
OQA com função coeficiente de redução constante
aplicado ao transporte escalar interfacial turbulento**

VERSÃO CORRIGIDA

São Carlos - SP

2014

BRUNO BATISTA GONÇALVES

**Detalhando a solução unidimensional do método de
OQA com função coeficiente de redução constante
aplicado ao transporte escalar interfacial turbulento**

Dissertação apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências: Engenharia Hidráulica e Saneamento.

Orientador: Prof. Dr. Harry Edmar Schulz

VERSÃO CORRIGIDA

São Carlos – SP

2014

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES TRABALHOS, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento da
Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP**

G635d

Gonçalves, Bruno Batista

Detalhando a solução unidimensional do método de OQA com função coeficiente de redução constante aplicado ao transporte escalar interfacial turbulento / Bruno Batista Gonçalves; orientador Harry Edmar Schulz. São Carlos, 2014.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação e Área de Concentração em Hidráulica e Saneamento -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2014.

1. Transferência escalar interfacial. 2. Turbulência. 3. Ondas Quadradas Aleatórias. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **BRUNO BATISTA GONÇALVES**.

Título da dissertação: "Detalhando a solução unidimensional do método de OQA com função coeficiente de redução constante aplicado ao transporte escalar interfacial turbulento".

Data da defesa: 14/03/2014

Comissão Julgadora:

Resultado:

Prof. Titular **Harry Edmar Schulz (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

APROVADO

Prof. Associado **Oscar Maurício Hernandez Rodriguez**
(Escola de Engenharia de São Carlos/EESC)

APROVADO

Prof. Dr. **José Eduardo Alamy Filho**
(Universidade Federal de Uberlândia/UFU)

APROVADO

Coordenadora do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Hidráulica e Saneamento:

Profa. Associada **Maria Bernadete A. Varesche Silva**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:

Prof. Titular **Denis Vinicius Coury**

Aos meus pais, JAIR e GELVA.

Aos meus irmãos, JAIR, LÍVIA e LIDIANA.

Com amor, gratidão e admiração.

AGRADECIMENTOS

O sucesso deste trabalho só foi possível devido ao incentivo e a dedicação do meu orientador, Prof. Harry Edmar Schulz. Meus sinceros agradecimentos pela orientação e oportunidade de realizar esta interessante pesquisa. Agradeço também pelo compartilhamento de seus conhecimentos, pela amizade e pela confiança depositada no meu trabalho.

Sou grato também aos colegas, professores e técnicos do Departamento de Hidráulica e Saneamento, que de alguma forma contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.

Agradeço o suporte financeiro concedido pelo CNPq, sem o qual a realização desta pesquisa não seria possível.

Agradeço aos amigos e familiares que me deram incentivos para a realização desta conquista. Em especial ao amigo Hercules Dias pelo companheirismo e apoio durante minha permanência em São Carlos.

Por fim, minha amorosa gratidão a Deus.

“True Laws of Nature cannot be linear.”

ALBERT EINSTEIN

“... the progress of physics will to a large extent depend on the progress of nonlinear mathematics, of methods to solve nonlinear equations... and therefore we can learn by comparing different nonlinear problems.”

JOHN VON NEUMANN

“As long as a branch of knowledge offers an abundance of problems, it is full of vitality.”

DAVID HILBERT

RESUMO

Gonçalves, B. B. (2014). *Detalhando a solução unidimensional do método de OQA com função coeficiente de redução constante aplicado ao transporte escalar interfacial turbulento*. 2014. Dissertação (Mestrado), Departamento de Hidráulica e Saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo. 185 p. São Carlos, SP.

A adequada quantificação do transporte interfacial de escalares em escoamentos turbulentos é de interesse prático para os processos industriais e para a gestão dos problemas ambientais. O fenômeno é matematicamente complexo devido ao uso de equações governantes estatísticas não lineares e não fechadas. Neste estudo, analisam-se detalhes do método de Ondas Quadradas Aleatórias (OQA), o qual fornece uma quantificação estatística que permite fechar as equações e obter um perfil normalizado da grandeza de interesse para a transferência unidimensional turbulenta de escalares, que, num caso idealizado, depende de apenas dois parâmetros adimensionais, A e k (neste caso, k representa um coeficiente de transferência e A depende da interação entre os fenômenos de transporte molecular e turbulento). Simulações numéricas foram realizadas no intuito de se verificar a influência das derivadas de ordem superior para a função normalizada de concentração. A sensibilidade do modelo e a análise de aspectos intrínsecos ao mesmo foram também realizadas. Importante análise das condições de contorno empregadas foi desenvolvida com a inserção de um contorno adicional, com base física, no seio líquido. Como os estudos iniciais tinham se concentrado em exemplos de transferência de massa, uma extensão para o caso de transporte de calor foi considerada. Os resultados obtidos reproduzem o comportamento dos dados experimentais observados na literatura.

Palavras-chave: transferência escalar interfacial, turbulência, ondas quadradas aleatórias.

ABSTRACT

Gonçalves, B. B. (2014). *Detailing the onedimensional solution of RSW's method considering a constant reduction function applied to the turbulent interfacial scalar transport*. 2014. Dissertação (Mestrado), Departamento de Hidráulica e Saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo. 185 p. São Carlos, SP.

The adequate quantification of interfacial scalar transport in turbulent flows is of practical interest for industrial processes and in environmental problems. The phenomenon is mathematically complex due to the use of unclosed nonlinear statistical equations. In this study, we analyze details of the method of Random Square Waves (RSW), which provides a statistical quantification that allows closing the set of equations and getting the normalized scalar profile of the one-dimensional turbulent scalar variable, which, in an idealized case, depends on only two nondimensional parameters, k and A (in this case, k represents a transfer coefficient and A depends on the interaction between the molecular and turbulent transports). Numerical simulations were performed in order to verify the influence of the higher order of derivatives over the normalized concentration function. The sensitivity of the model to the relevant parameters and the analysis of its intrinsic parameters were also performed. An important aspect is the analysis of the boundary conditions, for which an additional condition was proposed and employed in the bulk liquid (with based on physical grounds). Because the initial studies have focused on examples of mass transfer, an extension to the case of heat transport was here considered. The results reproduce the behavior of experimental data reported in the literature.

Keywords: interfacial scalar transport, turbulence, random square waves (RSW).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Variação da concentração próxima à superfície e respectivas camadas de transferência. Adaptada de Janzen (2006).....	51
Figura 2: Variação de concentração segundo uma onda quadrada aleatória em um ponto próximo à superfície	57
Figura 3: Flutuações de concentração de oxigênio em experimentos com tanque de grades oscilantes. Adaptada de Janzen (2006)	59
Figura 4: Desenvolvimento temporal da concentração, considerando uma redução P para C_S e um incremento N para C_∞	60
Figura 5: Perfil de concentração c oscilando entre as funções $C_S(t)$ e $C_\infty(t)$. Adaptado de Schulz et al (2011a)	62
Figura 6: Representação da concentração c no tempo simplificada em uma onda quadrada aleatória bimodal. Adaptado de Schulz et al (2011b).....	63
Figura 7: Flutuações de concentração e velocidade justapostas. Adaptado de Schulz et al (2011a)	67
Figura 8: Função partição de velocidade m e escala de velocidade U . Adaptado de Schulz et al (2011a)	68
Figura 9: Condições de contorno e esquema físico para o problema de transferência de massa através da interface ar-água.....	78
Figura 10: a) Condições de contorno conhecidas e da equação (60), b) Condições de contorno conhecidas e estimadas, para o problema de transferência unidimensional interfacial de massa segundo utilização do método das OQAs e a aproximação linear do perfil junto à superfície	81
Figura 10: c) Condições de contorno conhecidas e estimadas com a aproximação linear do perfil junto à superfície, considerando $I=0$	85
Figura 11: Perfis de α e respectiva dependência com a agitação do meio. Schulz e Janzen (2009).....	90
Figura 12: Pontos auxiliares secundários de n	92
Figura 13: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,002, A=0,39, n'''(1) = -0,0258$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	97
Figura 14: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,0025, A=0,46, n'''(1) = -0,0297$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	98
Figura 15: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,003, A=0,6, n'''(1) = -0,0332$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	99
Figura 16: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,004, A=0,32, n'''(1) = -0,0526$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	99
Figura 17: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,004, A=0,69, n'''(1) = -0,0421$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	100

Figura 18: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,0015, A=0,37, n'''(1) = -0,02$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	100
Figura 19: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0045, A \approx 0,398, n'''(1) = -0,053$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	106
Figura 20: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0045, A \approx 0,398, n'''(1) = -0,053$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-3}$	107
Figura 21: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,002, A=0,39, n'''(1) = -0,0258$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	107
Figura 22: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0025, A=0,46, n'''(1) = -0,0297$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	108
Figura 23: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,0016, A=0,3, n'''(1) = -0,0235$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	109
Figura 24: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0016, A=0,3, n'''(1) = -0,0235$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	109
Figura 25: Gráfico “tamanho do salto” versus Δz^* . $k=0,0016, A=0,3$ e $n'''(1) = -0,0235$	110
Figura 26: Esquema de procedimento de maior discretização no entorno de z_d^* . Adaptado de Gonçalves e Schulz (2013).....	112
Figura 27: Perfis de n para diferentes condições dadas pelos parâmetros A e k	112
Figura 28: Valores calculados e mensurados de n	113
Figura 29: Algoritmo para obtenção dos perfis normalizados n para o modelo unidimensional	118
Figura 30: Gráfico $A \times k$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-2}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	120
Figura 31: Gráfico $A \times k$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-3}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	121
Figura 32 Regiões da relação $A \times k$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-3}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	122
Figura 33: Gráfico $A \times k$ e $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-2}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	123
Figura 34: Gráfico $A \times k$ e $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-3}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	123
Figura 35: Gráfico $A \times k$ e $n'(0)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-2}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$.	124
Figura 36: Gráfico $A \times k$ e $n'(0)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-3}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$.	124
Figura 37: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-2}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	126
Figura 38: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-3}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	127
Figura 39: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$ com a variação de $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-2}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	128
Figura 40: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$ com a variação de $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-3}, \Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	129
Figura 41: Perfis de n para $0,01 \leq A \leq 0,25$ e $1 \times 10^{-5} \leq n'''(1) < 1 \times 10^{-3}$. $\Delta k = 1 \times 10^{-4}, \Delta A=1 \times 10^{-2}, \Delta n'''(1)=1 \times 10^{-2}$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	131

Figura 42: Perfis de n , n' e n'' . $k=0,003$, $A=0,4$, $n'''(1) \approx -0,036319$, $C \approx 1346,170889$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$	138
Figura 43: Gráfico A x k x C . $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$	140
Figura 44: Perfil de IJ^* . $k=0,002$, $A=0,39$, $n'''(1) = -0,0258$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$	141
Figura 45: Perfis de n , n' , n'' , n''' . $k=0,001$, $A=0,22$, $n'(0) = -2,29993$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$	147
Figura 46: Restrição entre n_T e A_T no arco tangente hiperbólico	159
Figura 47: Perfis mensurados de $\theta_{aquecida}$ com diferentes números de Rayleigh e perfil calculado de $\theta_{aquecida}$ com $A_T=0,41$, $j_T(0)=-101$, $w_T(0)=2800$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-3}$	161

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação dos modelos <i>a posteriori</i> da turbulência	46
Tabela 2 – Coeficientes de difusão binária de soluções de líquidos diluídos a 1 atm	47
Tabela 3 – Valores propostos de q para modelos de difusão turbulenta	55
Tabela 4 – Perfis de n, n', n'', n''' para diferentes Δz^* . $k=0,0045, A\approx 0,398, n'''(1)=-0,053$	103
Tabela 5 – “Tamanho do salto” no perfil de $n'''(z^*)$ para diferentes Δz^*	110
Tabela 6 – Valores de n, n', n'', n''' para teste realizado em ambas as direções: do gás para o seio líquido e do seio líquido para o gás.....	111
Tabela 7 – Diferentes condições de parâmetros para análise de sensibilidade.....	119
Tabela 8 – Número de perfis soluções dos testes de análise de sensibilidade, $n(0)=1\pm 0,1\%$	120
Tabela 9 – Resultado do teste de comparação para $n'''(1)\approx -0,036319$ e $C\approx 1346,170889$. $A=0,4, k=0,003$ e $\Delta z^*=1\times 10^{-4}$	137
Tabela 10 – Maior e menor desvio em módulo e desvio acumulado para os perfis das funções $n(z^*), n'(z^*)$ e $n''(z^*)$. $n'''(1)\approx -0,036319, C\approx 1346,170889, A=0,4, k=0,003$ e $\Delta z^*=1\times 10^{-4}$	137
Tabela 11 – Valores de $n'''(0)$ obtidos pela integração numérica e pela equação (61a) para $k=0,001$	145
Tabela 12 – Valores obtidos com o refino de A para uma região onde ocorre mudança de sinal da segunda derivada, $k=0,0045$	145
Tabela 13 – Perfis válidos para integração numérica iniciando em $z^*=0$. $\Delta k = 1\times 10^{-3}$, $\Delta A=1\times 10^{-2}, \Delta n'(0)=1\times 10^{-1}$ e $\Delta z^*=1\times 10^{-4}$	146

LISTA DE SÍMBOLOS

A	parâmetro relacionada à função de redução para a concentração ($=1-\alpha$), adimensional
A_T	parâmetro relacionado à função de redução para a temperatura ($=1-\alpha_T$), adimensional
a	constante, adimensional
C	fator de calibração para a equação de concentração, adimensional
C_S	concentração na superfície, Kg/m^3
C_T	fator de calibração para a equação de temperatura, adimensional
C_∞	concentração no seio fluido, Kg/m^3
$C^{1,2,\dots}$	conjunto das derivadas contínuas de uma função
c	concentração, Kg/m^3
c'	flutuação de concentração, Kg/m^3
$\bar{c}$	concentração média, Kg/m^3
c_e	calor específico à pressão constante, $kJ/kg^\circ C$
c'_1	flutuação superior de concentração, Kg/m^3
c'_2	flutuação inferior de concentração, Kg/m^3
D	coeficiente de difusividade molecular ou coeficiente de difusão, m^2/s
D_t	coeficiente de difusão turbulenta, m^2/s
E	espessura da camada de transferência, m
$E[f]$	valor esperado da variável de uma função
$F_{1,2,\dots}$	função matemática
$f_{1,2,\dots}$	função matemática
h	variação para o método de Runge-Kutta
I	integral adimensional da função de partição n , adimensional
IJ	parâmetro de agrupamento para o caso de concentração, m/s
IJ^*	parâmetro de agrupamento para o caso de concentração, adimensional

IJ_T	parâmetro de agrupamento para o caso de calor, m/s
IJ^*_T	parâmetro de agrupamento para o caso de calor, adimensional
i	iteração atual
j	primeira derivada adimensional da função de partição n (n'), adimensional
K	coeficiente de transferência de massa, $1/s$
k	parâmetro adimensional, adimensional
$k_{1,2,...}$	coeficiente de ponderação para o método de Runge-Kutta
k_T	condutividade térmica, W/mK (ou $W/m^\circ C$)
m	função de partição para a velocidade, adimensional
$\dot{m}$	fluxo de massa, $kg/(m^2s)$
N	variável de incremento
n	função de partição para a concentração, adimensional
n_d	valor da função n no ponto de singularidade, adimensional
n_T	função de partição para a temperatura, adimensional
$n_{z^*_i}$	valor de n para a posição z^* no ponto de inflexão, adimensional
$n^a_{i-1/2}$	ponto auxiliar secundário a da função n (notação similar para j , w , dw/dz^* e I), adimensional
$n^b_{i-1/2}$	ponto auxiliar secundário b da função n (notação similar para j , w , dw/dz^* e I), adimensional
P	variável de redução
Pr	número de Prandtl, adimensional
p	pressão, N/m^2
p_c	posição do pico da função RMS da flutuação de concentração, m
q	constante, adimensional
Ra	número de Rayleigh, adimensional
Re	número de Reynolds, adimensional
$r(z)$	função coeficiente de correlação entre velocidade e concentração
T	temperatura, K (ou $^\circ C$)

T_S	temperatura na superfície, K (ou °C)
T_∞	temperatura no seio fluido, K (ou °C)
$\bar{T}$	temperatura média, K (ou °C)
T_{aquecida}	temperatura na placa aquecida, K (ou °C)
$T_{\text{resfriada}}$	temperatura na placa resfriada, K (ou °C)
t	tempo, s
U	velocidade auxiliar, m/s
u	vetor velocidade, m/s
u'	flutuação de velocidade, m/s
$\bar{u}$	velocidade média, m/s
w	segunda derivada adimensional da função de partição n (n''), adimensional
w'	flutuação vertical de velocidade, m/s
w'_1	flutuação vertical positiva de velocidade, m/s
w'_2	flutuação vertical negativa de velocidade, m/s
x	coordenada horizontal, m
y	primeira derivada adimensional da função de partição n_T , adimensional
z	coordenada vertical, m
z^*	distância vertical adimensional, adimensional
z^+	distância vertical adimensional a partir da interface (z/p_c), adimensional
z^*_d	posição de z^* no ponto de singularidade, adimensional
z^*_m	posição onde ocorre a média das temperaturas das placas, adimensional

Símbolos gregos

α	função coeficiente de redução para a concentração, adimensional
α_T	função coeficiente de redução para a temperatura, adimensional
β	função coeficiente de superposição para a concentração, adimensional
β_T	função coeficiente de superposição para a temperatura, adimensional
δ_c	espessura da camada limite de concentração, m

$\bar{\theta}_{aquecida}$ perfil normalizado de temperatura média junto à placa aquecida, adimensional

$\bar{\theta}_{resfriada}$ perfil normalizado de temperatura média junto à placa resfriada, adimensional

θ ordem do balanço dos momentos centrais para a flutuação de concentração

θ_T' flutuação de temperatura, K (ou °C)

μ viscosidade dinâmica do fluido, kg/ms

ν viscosidade cinemática do fluido, m^2/s

ρ massa específica do fluido, kg/m^3

σ ordem do balanço dos momentos centrais para a flutuação de temperatura

ψ função que representa a “taxa” de variação para o método de Runge-Kutta

Ω constante, adimensional

Outros símbolos:

∇ divergente

$\hat{p}$ função densidade de probabilidade

$\sqrt{w'^2}$ RMS de velocidade (escala referencial de velocidade), m/s

$erfc$ função erro complementar

sen seno

$tanh^{-1}$ arco tangente hiperbólico

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	31
1.1 Contextualização.....	31
1.2 Objetivos.....	35
1.3 Considerações Iniciais.....	35
1.4 Estrutura da Dissertação	40
 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	43
2.1 Problema de Fechamento	43
2.2 Definições Estatísticas utilizadas no Desenvolvimento de Equações em Regime Turbulento	45
2.3 Modelos de Turbulência.....	46
2.4 Difusividade Molecular de Massa	47
2.5 Equação da Advecção-Difusão	48
2.6 Camada Limite de Concentração	50
2.7 Modelos de Transferência Gasosa Interfacial	51
2.7.1 Modelo dos Filmes	51
2.7.2 Modelos de Renovação Superficial	52
2.7.3 Modelos dos Filmes e Renovação Combinados.....	53
2.7.4 Modelos de Difusão Turbulenta	54
2.8 Método OQA	56
2.8.1 Princípio e Desenvolvimento	56
2.8.2 Método OOA Aplicado ao Transporte Unidimensional Interfacial Turbulento de Massa	61
2.8.2.1 Função de Partição	64
2.8.2.2 Função Coeficiente de Redução.....	64
2.8.2.3 Função Coeficiente de Superposição e Correlação entre Velocidade e Concentração	66
2.8.2.4 Flutuações de Concentração em torno da Média	67
2.8.2.5 Flutuações de Velocidade e RMS de Velocidade	68
2.8.2.6 Momentos Centrais das Flutuações de Concentração	69

2.8.2.7 Fluxo Turbulento de Massa	70
2.8.2.8 Derivadas de Variáveis Médias.....	71
2.8.2.9 Equações de Conservação de Massa Expressas em Parâmetros do Método OQA.....	72
2.8.3 Caso Simplificado de Transferência Unidimensional Turbulenta de Massa Segundo o Método OQA	73
3 PROPOSTA.....	77
3.1 Novas Condições de Contorno Adicionadas às Condições de Contorno Usuais para o Transporte Interfacial de Massa.....	77
3.1.1 Condição de Contorno em $z^*=1$	77
3.1.2 Condição de Contorno em $z^*=0$	79
3.1.3 Conjunto das Condições de Contorno para o Problema	81
3.2 Uso de uma Equação de Segunda Ordem (Equação Integrada) na Representação do Perfil de Concentrações.....	83
3.3 Transporte de Calor.....	85
3.4 Material e Métodos	86
4 AVALIAÇÃO DO PONTO SINGULAR.....	89
4.1 Solução Numérica da Equação (58).....	89
4.1.1 Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem	90
4.1.2 Simulação Numérica.....	92
4.1.3 Aplicando o Modelo	94
4.2 Testes, Resultados e Análise da Singularidade.....	96
4.3 Comparação dos Perfis Obtidos de n com Dados Experimentais.....	113
4.4 Conclusões.....	114
5 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE.....	117
5.1 Algoritmo.....	117
5.2 Resultados e Análise de Sensibilidade	119
5.3 Valor Nulo para a Segunda Derivada em $z^*=1$	130
5.4 Conclusões.....	131

6	EQUAÇÃO DE SEGUNDA ORDEM PARA n E ANÁLISE DO CONTORNO DECORRENTE DA OPERAÇÃO DE EXTRAPOLAÇÃO PRÁTICA.....	133
6.1	Equação de Segunda Ordem para Representação do Perfil de Concentrações	133
6.2	Parâmetros II^* e β	140
6.3	Contorno Decorrente da Operação de Extrapolação Prática	142
6.4	Conclusões.....	148
7	TRANSPORTE TURBULENTO DE CALOR SEGUNDO O MÉTODO OQA.....	151
7.1	Equação da Advecção-Difusão para Energia Térmica em Fluxo Turbulento	151
7.2	Equações de Conservação de Energia Térmica expressas em Parâmetros do Método OQA	153
7.3	Condições de Contorno para o Transporte Turbulento de Calor	157
7.4	Solução Numérica da Equação (98) e Comparação com Dados Experimentais	160
7.5	Conclusões.....	161
8	CONCLUSÕES GERAIS E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	163
8.1	Conclusões Gerais.....	163
8.2	Recomendações para Trabalhos Futuros.....	165
Apêndice A	– Equação de Conservação de Massa baseada no Momento Central	167
Apêndice B	– Tabelas Resumo para aplicação do Método Runge-Kutta no Programa Microsoft Excel®	171
Apêndice C	– Perfis: Teste VIII	173
Apêndice D	– Perfis para $\Delta A=1 \times 10^{-5}$ com $k=0,0045$	179
Referências		183

1 INTRODUÇÃO

O transporte turbulento de massa através da interface ar-água e sua adequada quantificação são de interesse prático para os processos industriais e para a gestão dos problemas ambientais. Contudo, o fenômeno é matematicamente complexo devido ao uso de equações governantes estatísticas não lineares e não fechadas, sendo este não fechamento um problema desafiador para os pesquisadores. Esta dissertação analisa detalhes do método de Ondas Quadradas Aleatórias (OQA), o qual fornece uma quantificação estatística que permite obter um perfil normalizado de concentração para a transferência unidimensional turbulenta de massa a partir de uma equação governante fundamentada nos princípios de conservação, que, num caso idealizado, depende de apenas dois parâmetros adimensionais, A e k . Este capítulo inicia-se com a contextualização do tema em análise, com enfoque na Turbulência, seguido dos objetivos utilizados no direcionamento da pesquisa. Apresentam-se, também, algumas considerações iniciais que visam a oferecer ao leitor uma melhor compreensão acerca do enquadramento do trabalho. Por último, é apresentada a estrutura desta dissertação.

1.1 Contextualização

O conhecimento gerado pela ciência caracteriza-se por um constante aperfeiçoamento dos estudos alternando-se as investigações fenomenológicas com os questionamentos conceituais ou teóricos. Assim, observações, deduções matemáticas, argumentos heurísticos, tratamentos empíricos ou semiempíricos de vários pesquisadores ao longo da história se multiplicam no domínio de qualquer dos ramos das ciências ditas “naturais”. Baseados em modelos que possam descrever os eventos observados, os fenômenos são estudados de forma a apresentar um aspecto prático que possibilite seu emprego no desenvolvimento de diferentes atividades humanas.

No contexto desse contínuo aprimoramento, e ainda no vigor dos estudos, têm-se o clássico exemplo do fenômeno da turbulência e da quantificação dos fenômenos de transporte a ele associados. O estudo da turbulência em fluidos, efetuado como um ramo da Mecânica dos

Fluidos, não apresenta ainda consenso no que tange à sua quantificação estatística. Muitos pesquisadores, contando com os desenvolvimentos da matemática moderna e da computação, pesquisam propostas e modelos que possam corroborar observações e avançar no conhecimento dessa área. Um possível exemplo desse tipo de postura encontra-se em Schulz (2003), que, entre outras observações similares, menciona que a quantificação dos fenômenos de transferência que ocorrem em interfaces gás-líquido é desafiadora e também não possui equacionamento definitivo.

Não se deduz, contudo, que essa área do conhecimento seja recente. As grandes civilizações cresceram em torno das águas e certamente seus cientistas se ocuparam com problemas que envolviam a turbulência no líquido. Assim, cinco mil anos de civilização provavelmente colocaram estudiosos da China frente a frente com questões práticas de turbulência nos milênios passados. No caso da civilização europeia ocidental, bem mais recente, Leonardo da Vinci, no século XVI, registrou seus primeiros tentames sobre turbulência, não fornecendo uma quantificação, mas oferecendo uma descrição. De forma quantitativa, ilustres pesquisadores do cenário científico mundial geraram posteriormente descrições mais detalhadas. Segundo Mathieu e Scott (2000), a teoria da turbulência teve um progresso considerável na segunda metade do século XX, porém, à primeira vista, menos acentuada do que o esperado no início do referido século. Isso porque as bases do assunto lançadas por pesquisadores como Reynolds, Taylor, Prandtl, Von Karman e Kolmogorov, por exemplo, que atuaram mais intensamente na primeira metade do século XX, permitiam antever uma descrição estatística mais “aceitável” dos fenômenos erráticos vinculados à turbulência dos fluidos. Não obstante, esses estudos suscitaram uma série de livros e pesquisas na década de cinquenta e décadas posteriores.

A dificuldade intrínseca dos escoamentos turbulentos pode ser concluída de sua própria acepção. Segundo Mathieu e Scott (2000), a turbulência é definida como um fenômeno natural oscilatório e não previsível que apresenta como característica típica flutuações de velocidades aparentemente aleatórias com uma vasta gama de diferentes escalas de comprimento e de tempo. A vida cotidiana fornece uma compreensão intuitiva acerca da turbulência em fluidos, citando como exemplos o escoamento em torno de um aerofólio, a maioria das correntes atmosféricas marítimas e terrestres, o escoamento de rios, e, até mesmo, o movimento da atmosfera do Sol e demais planetas. Portanto, o conceito é aceito sem maiores discussões.

Por se tratar de um fenômeno físico tido como aleatório, o estudo da turbulência considera a evolução de determinadas grandezas ao longo do espaço e do tempo, como a pressão e a

velocidade, por exemplo, e define funções médias para essas grandezas como recurso à minimização da complexidade do fenômeno. Para Davidson (2004), qualquer teoria de previsão em turbulência deve trabalhar com quantidades estatísticas, e, de fato, esta é a base para a maioria das abordagens teóricas.

Ressalva-se que a análise estatística da turbulência, iniciada com a “decomposição de Reynolds” (que consiste na divisão de uma grandeza instantânea em uma componente média e uma componente de flutuação em torno da média), nome que se estabeleceu devido ao autor Osborne Reynolds em 1894, constituiu um avanço para os estudos nessa área, possibilitando localizar os seus limites, como menciona Lopes Júnior (2012, p. 12), “ferramentas estatísticas valorizam grandezas médias de variáveis que possuem características ‘quase aleatórias’, uma vez que suas flutuações são limitadas por propriedades moleculares como viscosidade e difusividade”.

A instabilidade característica de grande parte dos escoamentos turbulentos pode ser estudada, também, segundo conceitos desenvolvidos na Teoria do Caos. A evolução para esse estado final de aleatoriedade pode seguir padrões determinísticos explorados pela própria Teoria do Caos (ver, por exemplo, Lopes Júnior, 2012).

Outras áreas do conhecimento também trouxeram impulso para o estudo da turbulência, como a análise espectral de energia e as Simulações Numéricas Diretas (SND). Mas o uso de SND possui limitações quanto ao custo computacional, por exemplo, no presente momento dos desenvolvimentos tecnológicos.

Apesar da utilização de ferramentas estatísticas (como funções de probabilidade, momentos estatísticos, operações de média, autocorrelação e etc.) constituírem uma maneira de contornar a complexidade analítica do fenômeno natural da turbulência, tem-se aquilo que se convencionou denominar de “problema de fechamento das equações estatísticas” resultantes. O problema de fechamento é caracterizado pela geração de mais incógnitas do que o número de equações relacionando-as, o que ocorre devido à não linearidade do equacionamento governante. Nessa altura dos equacionamentos, não havendo ainda uma descrição da física da turbulência que introduza o princípio correto para sua quantificação definitiva, são introduzidos os assim denominados “modelos de turbulência”, que são aproximações fundamentadas no bom senso e experiência dos seus proponentes.

Os modelos de turbulência, portanto, são alternativas para o problema de fechamento, havendo um número razoável deles, dos quais alguns se tornaram clássicos e frequentes na literatura da área. Schulz et al (2011a) consideram uma distinção desses modelos entre *a priori* e *a posteriori*. Assim, modelos para turbulência considerados *a priori* definem em sua

conceituação inicial todas as grandezas para o estudo em questão, até mesmo as que eventualmente venham a surgir no problema de fechamento. Quanto aos modelos *a posteriori*, as grandezas que caracterizam o não fechamento são estudadas em separado com a inserção de novos modelos empíricos ou heurísticos. Essa descrição induz uma aparente simplificação e objetividade dos modelos com considerações *a priori*.

A utilização de simplificações e/ou aproximações através de modelos propostos por vários pesquisadores acabaram por tornar suas soluções casos particulares e, ademais, às vezes, distanciados consideravelmente do caso real. Pope (2000) cita, por exemplo, que as precisões da hipótese da viscosidade turbulenta de Boussinesq estão aquém das esperadas para muitos escoamentos observados experimentalmente. Observa-se que, mesmo assim, essa hipótese é comumente utilizada nos modelos *a posteriori*.

Algumas quantificações estatísticas *a posteriori* usam, por exemplo, a difusividade turbulenta modelada através da definição de mais grandezas adicionais. Os modelos mais comuns usam duas grandezas adicionais, as quais, por sua vez, são avaliadas segundo duas equações de transporte adicionais. Como exemplo típico tem-se o modelo $k-\varepsilon$ (que utiliza uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta, k , e outra para a taxa de dissipação dessa energia, ε), sendo considerada também a hipótese de Boussinesq sobre o fluxo turbulento de quantidade de movimento. Porém, nem k nem ε são conhecidos junto a interfaces livres, necessitando, portanto, de modelos adicionais para essas posições “limítrofes” dos escoamentos.

Uma das possibilidades de quantificação estatística para a transferência interfacial turbulenta de massa é o uso de simplificações *a priori* com o emprego de ondas quadradas aleatórias bimodais, apresentado com mais detalhes em Schulz et al (2011a, 2011b). Apesar de haver uma bibliografia menos recente do autor mencionado e colaboradores, os textos que trazem as deduções com mais detalhes são esses mencionados. Esse método define um número finito de parâmetros, que geram assim funções paramétricas que, por sua vez, caracterizam o transporte de escalares em análise nesta dissertação. Acresce-se, e justifica-se o trabalho, que aspectos intrínsecos desse método necessitam ser analisados, uma vez que sua apresentação, segundo o caso idealizado em análise, é razoavelmente recente.

1.2 Objetivos

Como objetivo geral, busca-se inferir as características e/ou limitações de um modelo estatístico, baseado no método de OQA, para transferência unidimensional de massa em meio turbulento.

Os objetivos específicos são:

- Analisar as equações e termos gerados pelo modelo idealizado;
- Avaliar a abrangência e sensibilidade do modelo através de simulações numéricas;
- Apresentar nova condição de contorno, com base física, adequado ao modelo unidimensional proposto na literatura;
- Avaliar a influência das derivadas de ordem superior (decorrentes do método OQA e processo de parametrização) sobre as previsões obtidas para o perfil adimensional de concentração;
- Avaliar o ponto singular apresentado no perfil da derivada terceira da concentração e consequente validade da integração numérica;
- Avaliar as limitações decorrentes da hipótese do parâmetro adimensional A (função de redução das flutuações de concentração devido aos efeitos difusivos) ser considerado constante.

1.3 Considerações Iniciais

A massa, a quantidade de movimento e a energia são grandezas físicas que se conservam e constituem o conjunto mais usual de grandezas físicas abordado em fenômenos de transporte. Evidentemente todas as propriedades extensivas agrupam-se sob a mesma formulação utilizada nos fenômenos de transporte, como é o caso da entropia, por exemplo. Essa área do conhecimento (fenômenos de transporte) busca caracterizar processos de transferência dessas grandezas físicas básicas, representando-os através de modelos matemáticos adequados.

Ao se estudar o transporte de uma grandeza escalar em um escoamento, seguem-se princípios de conservação para a própria grandeza. Como consequência, a partir de estudos dos efeitos

de um escoamento sobre um composto transportado em um fluido obtêm-se características do próprio escoamento, uma vez que as propriedades físicas mencionadas estão sujeitas às condições do próprio escoamento.

No presente estudo, o tema é o transporte turbulento interfacial de um escalar. Mas, em reserva a ilação do comportamento do escoamento turbulento, qual a relevância do conhecimento do transporte interfacial de compostos neste escoamento? Em outros termos, tal estudo encontra um meio aplicativo no contexto atual?

Utilizando uma referência mais vinculada ao próprio tema desta dissertação, Schulz (2003) cita, por exemplo, o auxílio no estudo de questões de difusão de poluentes na água, no ar e no solo, do controle de poluentes nas águas marítimas e continentais, e dos processos de tratamento de águas residuárias. Para a engenharia química e a indústria têm-se as questões específicas de troca de massa em interfaces líquido/gás. Mas, considerando referências mais recentes, simpósios são feitos regularmente tratando especificamente do tema de transferência interfacial de massa, sendo a série “Gas Transfer at Water Surfaces” talvez o exemplo mais relevante. Nesse sentido, a publicação de Komori et al (2011) mostra muitos dos aspectos atualmente considerados nessa área do conhecimento, contendo, inclusive, a contribuição das OQAs. Em termos internacionais, mas ainda não considerada no interior das fronteiras nacionais, a Mecânica dos Fluidos Ambiental é uma área de amplos e relevantes estudos, sendo a transferência interfacial de massa um dos aspectos importantes dessa área. Um exemplo de referência que atesta esta relevância é Rodi e Uhlman (2012), elaborada pela “International Association for Hydro-Environment Engineering and Research” - IAHR e custeada pelo “International Hydrological Programme” – IHP/UNESCO. Embora os programas de graduação e de pós-graduação “intra-fronteiras” em Engenharia ou Ciências Ambientais ainda se concentrem nos aspectos qualitativos e de gestão, as soluções aos grandes problemas ambientais gerados ou experimentados pela sociedade contemporânea obrigatoriamente passa pela Mecânica dos Fluidos, pelo simples fato de os nossos ambientes “serem fluidos” (literalmente, fisicamente). O acúmulo de massas indesejáveis pela poluição química e de energia térmica comprometem o bem-estar da humanidade, o que evidencia a atualidade do tema. Vale mencionar que uma literatura internacional com caráter mais aplicativo tem sido gerada voltada ao uso da Mecânica dos Fluidos em questões ambientais, como pode ser visto no livro Schulz, Simões e Lobosco (2012), no qual o tema “Hydrodynamics: natural water bodies” foi abordado. Nesse sentido, evitando polemizar, mas apenas comentando, a aparente exclusão do contexto essencialmente físico/matemático dos programas nacionais voltados ao meio ambiente parece mais uma “garantia de nicho de

atuação” de grupos menos afeitos às complexidades físicas, do que uma característica real do meio ambiente e da ecologia nacionais.

Os fenômenos interfaciais de transporte de massa entre as fases gasosa e líquida são governados pelos mecanismos de difusão molecular e difusão turbulenta (quando o meio se movimenta “aleatoriamente”) e são quantificáveis a partir de diferentes pontos de vista, que podem se utilizar de abordagens microscópicas ou macroscópicas.

No enfoque microscópico não há a definição de uma fronteira interfacial “física”, ou seja, o meio é descontínuo. Torna-se necessário a utilização de perfis de concentração dos compostos (por exemplo, a água), ou de probabilidade de ocorrência das moléculas, e compensações de massa ou probabilísticas para se estabelecer uma posição média da região fronteira. No enfoque macroscópico considera-se a “Hipótese do Contínuo” com consequente fronteira “física” definida; sendo esta a abordagem utilizada neste trabalho.

A adequação dos fenômenos interfaciais para um aspecto contínuo induz à definição de constantes físicas, sendo apropriado o uso das ferramentas do Cálculo Diferencial e Integral aplicado às interfaces, segundo os princípios físicos de conservação já mencionados, juntamente com a utilização de coeficientes de transferência de massa, que “traduzem” para a visão contínua a possibilidade de fluxos de fato resultantes de deslocamentos discretos.

De forma conveniente, esses fluxos são quantificados pela diferença de concentração, sendo esses representados, na “visão” contínua, como proporcionais ao gradiente de concentração (∇c). A “constante” de proporcionalidade, para essa situação, é conhecida por difusividade molecular, D ; e seu valor pode variar para um mesmo composto, como função da temperatura, da pressão, da própria concentração do composto e, evidentemente, do meio no qual esse difunde. Adicionalmente, tendo em vista que cada espécie pode apresentar um fluxo diferenciado, esse parâmetro apresenta valores e tendências comportamentais distintas para distintos compostos (ÇENGEL E GHAJAR, 2012; SCHULZ, 2003; SISSON E PITTS, 1988). No caso de parcelas macroscópicas dos meios se movimentarem aleatoriamente (e não apenas as parcelas microscópicas) é necessário considerar esse movimento, uma vez que as propriedades físicas não dependem da composição dos compostos transferidos, e sim do grau de agitação do meio (uma introdução quantitativa é bem apresentada em Schulz, 2003, 2^a impressão). Esse efeito pode ser formulado de forma *ad hoc* e por analogia aos movimentos moleculares (sem justificativa física e matemática rigorosa) por uma adição à difusividade molecular de uma difusividade turbulenta (decorrente da assim denominada “hipótese de Boussinesq”).

Em resumo, os dois parágrafos anteriores se “materializam” na equação (1). A equação (1) fornece o fluxo unidimensional de massa em um meio fluido com escoamento turbulento. Essa equação é conhecida como a Lei de Fick para a transferência de massa em meio turbulento (rigorosamente, é a primeira lei de Fick, sem considerar deslocamentos de centros de massa, por exemplo).

$$\dot{m} = -(D + D_t) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (1)$$

$\bar{c}$ é a concentração média de massa [kg/m^3], D [m^2/s] é o coeficiente de difusão molecular, D_t [m^2/s] é o coeficiente de difusão turbulenta e $\dot{m}$ [$\text{kg}/(\text{m}^2\text{s})$] representa o fluxo de massa. O sinal negativo indica que o fluxo ocorre na direção decrescente de concentração. Çengel e Ghajar (2012), de forma comparativa, exemplificam que uma força motriz para o escoamento de um fluido é a diferença de pressão, havendo, para a transferência de massa, o similar da diferença de concentração. Note-se que em ambos os casos há outras forças motrizes, como a gravidade (para impor movimento ao fluido) e o movimento preferencial do meio (para impor deslocamentos de massa).

O regime turbulento é considerado, neste trabalho, como sendo o movimento aleatório de parcelas do corpo líquido, sendo essa característica inerente ao escoamento estudado e não uma propriedade que necessite valores explícitos para o *número de Reynolds*. Segundo Schulz (2003), a definição do ponto de passagem para o regime turbulento, considerando o número de Reynolds, é ainda especulado pelos pesquisadores e vários valores que caracterizam essa passagem são continuamente apresentados. Inclusive, alguns pesquisadores sugerem que esse “limite” de transição depende fortemente de outras propriedades do fluido além da viscosidade cinemática. No caso idealizado em análise, o grau de agitação do meio é considerado existente naturalmente, sendo expresso pelas flutuações de velocidade vertical e de concentração no meio líquido.

Acrescenta-se aqui que a equação (1) é um modelo que já transformou uma covariância estatística em um produto entre um gradiente médio e uma grandeza auxiliar, a difusividade turbulenta. Essa passagem *ad hoc* não é feita na metodologia de análise das OQAs, sendo esse um aspecto relevante dessa abordagem. Em outros termos, a hipótese de Boussinesq não é necessária, o que faz com que, para o caso unidimensional em estudo, também não sejam necessárias as considerações que visam a quantificar essa difusividade via analogia com a viscosidade e com as argumentações de Kolmogoroff (por exemplo) e seus seguidores (e que

conduzem ao modelo $k-\varepsilon$ de turbulência). Os assim denominados fluxos turbulentos, que são covariâncias, podem ser quantificados diretamente pela metodologia proposta, uma vez que as características dos regimes turbulentos e das grandezas físicas é que são analisadas e convenientemente definidas desde o princípio.

Escoamentos turbulentos são intrinsecamente não permanentes. Quando uma grandeza é representada segundo a *decomposição de Reynolds*, o valor médio pode ser variável ou não no tempo. Neste trabalho adotam-se duas condições que reproduzem a física dos experimentos e das condições naturais. Para o movimento turbulento do fluido existe a situação de não variação da média, conhecida como turbulência estacionária. Como exemplo, se a turbulência de um rio é produzida devido ao movimento induzido pela gravidade da terra (os rios se deslocam devido ao efeito da gravidade), essa continuará atuando ao longo do tempo, mantendo a turbulência. De forma metafórica, não se pode “desligar a gravidade” e suprimir a causa da turbulência e a própria turbulência decorrente. O presente estudo vale-se de resultados experimentais obtidos em um equipamento em que a turbulência era produzida por grades oscilantes, cuja oscilação era mantida ao longo do tempo em cada experimento. Assim, a turbulência se mantinha indefinidamente, de acordo com a vontade do experimentalista. Cada conjunto de medidas foi feito mantendo-se ligado o equipamento e, conseqüentemente, mantendo constante o nível de agitação turbulenta do líquido.

Porém, para a massa de gás absorvida pela água, há variação da propriedade média com o tempo. Ou seja, a concentração média de oxigênio varia no corpo líquido. Experimentalmente, a água do tanque com grades oscilantes era inicialmente desoxigenada (quimicamente ou fisicamente, ver Schulz, 1985, por exemplo, que utilizou ambos os métodos). Com as grades oscilando e a concentração de oxigênio subindo, considera-se o ponto de mínima concentração como o início do experimento e efetuam-se as medidas instantâneas de concentração. Uma vez que há contato com a atmosfera, o oxigênio passa a ser incorporado à água através da interface ar-água, aumentando a sua concentração no líquido. Tal descrição é necessária para que se entenda o termo “estacionário” para a turbulência. As propriedades estatísticas do escoamento se mantêm, mas não as propriedades estatísticas do elemento transportado.

A equação (2) define a decomposição de Reynolds para a velocidade u [m/s] ao longo do eixo x e do tempo t :

$$u(x, t) = \bar{u}(x) + u'(x, t) \quad (2)$$

Na equação (2) o uso da barra indica a componente média e o apóstrofo indica a componente de flutuação, simbologia empregada ao longo deste texto. A parcela de flutuação $u'(x,t)$ pode assumir valores positivos ou negativos ao longo do tempo.

A exposição e desenvolvimento do método OQA, e de outros assuntos adicionais, que se acreditam necessários para uma melhor compreensão desta pesquisa, são elencados no próximo capítulo e constituem, assim, uma revisão bibliográfica, desvinculada, contudo, de uma preocupação maior com detalhes pormenorizados, salvo exceção ao método em estudo.

Quanto aos novos entendimentos teóricos decorrentes deste trabalho, acerca dos quais o leitor pode justamente indagar, valem as seguintes passagens de Schulz (2003, p. 3 e 4), de que “os modelos são úteis para esclarecer os conceitos, mas não para ‘descrever’ os detalhes desses fenômenos” (enquanto as bases físicas não estiverem esclarecidas) e que “o suporte teórico possibilita criar uma sistematização para verificar os resultados experimentais e a previsibilidade das relações obtidas”.

A validade dos resultados, obtidos neste estudo, consistirá na comparação do perfil gerado pelo uso da presente metodologia frente aos dados experimentais dispostos por Janzen (2006). Concluídas essas considerações iniciais, compete por fim delinear a estrutura da dissertação em suas seguintes principais seções.

1.4 Estrutura da Dissertação

O capítulo 2, como já referido, apresenta os tópicos relevantes, de forma sucinta, da revisão da literatura e uma revisão detalhada do método OQA para o estudo proposto nesta dissertação. No capítulo 3 é apresentada a proposta para duas novas condições de contorno para a integração numérica da equação (58), bem como sugestões de teste e de trabalho para uma equação similar de segunda ordem. A proposta metodológica do trabalho é descrita, bem como os materiais utilizados na condução da pesquisa.

O desenvolvimento do trabalho é descrito nos capítulos 4, 5, 6 e 7. O capítulo 4 analisa o ponto de singularidade objetivando avaliar suas implicações e consequente validade dos resultados numéricos obtidos pela equação de terceira ordem para o perfil normalizado de concentração. A solução numérica, os resultados e discussões são também apresentados. O capítulo 5 avalia a abrangência do modelo através de uma análise de sensibilidade dos

parâmetros envolvidos. No capítulo 6 a equação similar de segunda ordem para o caso de transferência de massa é analisada. A proposta de um contorno de extrapolação linear é analisada frente aos resultados obtidos na pesquisa. O capítulo 7 apresenta uma extensão para o transporte escalar do caso de massa para o caso de calor, bem como os desenvolvimentos e conclusões acerca dos resultados obtidos.

No capítulo 8 apresentam-se as conclusões gerais do trabalho e as sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo inicia-se com a exposição, de forma sucinta, de determinados tópicos relevantes da revisão da literatura para o estudo em questão. Em seguida, uma revisão pormenorizada do método OQA aplicado ao transporte unidimensional turbulento de massa é apresentada.

2.1 Problema de Fechamento

Como já referido, o problema de fechamento da turbulência decorre de um número maior de incógnitas em relação às equações obtidas pelas teorias estatísticas da turbulência, necessitando de suposições heurísticas adicionais, ou seja, de modelos de turbulência a serem adicionados às equações de conservação. Davidson (2004) elucida que ao se derivar equações dinâmicas para quantidades estatísticas, partindo da aplicação da segunda lei de Newton a um diferencial de fluido (o que gera a equação de Navier-Stokes) é possível concluir que a velocidade u obedece a uma equação do tipo:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F_1(u, p) \quad (3)$$

Ou seja, a variação da velocidade no tempo obedece a uma função F_1 dependente da velocidade e da pressão, p [N/m²]. Aplicada à condição de fluido incompressível, pode-se encontrar uma equação para a pressão através da diferença com a equação de Navier-Stokes:

$$\nabla^2 \left(\frac{p}{\rho} \right) = -\nabla \cdot (u \cdot \nabla u) \quad (4)$$

Na equação (4), ρ [kg/m³] é a massa específica do fluido. Em um domínio infinito através da aplicação da lei de Biot-Savart, a equação (4) torna-se:

$$p(x) = \frac{\rho}{4\pi} \int \frac{[\nabla \cdot (u \cdot \nabla u)]'}{|x - x'|} dx' \quad (5)$$

dx' é um elemento infinitesimal de comprimento estabelecido ao longo do trajeto da velocidade (analogia com as distribuições unidimensionais de corrente segundo a lei de Biot-Savart). Observe que na equação (5) a pressão é determinada unicamente pela distribuição instantânea da velocidade. Assim, pode-se escrever de forma simbólica que:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F_2(u) \quad (6)$$

Esta equação determinística pode ser integrada ao longo do tempo para se encontrar $u(x,t)$, porém esse processo seria complexo dada a natureza “caótica” de u e, além disso, o objetivo é encontrar as propriedades estatísticas de u , como $\bar{u}$ (velocidade média) e $\overline{(u')^2}$ (média do quadrado das flutuações de velocidade) recorrentes nas equações estatísticas da turbulência.

Para encontrar essas quantidades estatísticas se faz necessário um conjunto de equações dinâmicas para essas quantidades que se assemelham à equação (6). Ainda segundo Davidson (2004), atualmente é possível trabalhar com a equação (6) em uma hierarquia de equações estatísticas na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\text{certas propriedades estatísticas de } u] \\ = F_3(\text{outras propriedades estatísticas de } u) \end{aligned} \quad (7)$$

Pode-se verificar assim que o sistema de equações não é fechado e que não importam quantas manipulações possam ser realizadas, sempre haverá mais incógnitas do que equações estatísticas relacionando-as.

O problema de fechamento implica que, considerando todo o rigor dos princípios estatísticos na geração das teorias estatísticas da turbulência, há a necessidade “contraditória” do acréscimo de suposições heurísticas, que por sua vez, são aceitas ou abolidas conforme a evidência experimental (DAVIDSON, 2004). Em suma, no final do processo matemático/estatístico o comando das soluções é entregue à heurística, o que não produz talvez o melhor quadro “científico” para essa solução.

2.2 Definições Estatísticas Utilizadas no Desenvolvimento de Equações em Regime Turbulento

Os dados que representam o fenômeno físico da turbulência são “aleatórios” e seus respectivos desenvolvimentos temporais não são possíveis de serem previstos sem incorrerem em erros de razoável magnitude (SCHULZ, 1985). Como já referido, a abordagem estatística da turbulência visa a avaliar o comportamento médio do fenômeno. Segundo a Estatística, o valor esperado de uma função $f(t)$, definido como $E[f(t)]$, pode ser estabelecido com o auxílio de uma função densidade de probabilidade $\beta(t)$. A função densidade de probabilidade é baseada na probabilidade de ocorrência de um esperado evento inserido em uma distribuição que represente a frequência de ocorrências de experimentos, cujo número de experimentos tenda ao infinito. O valor esperado da função $f(t)$ é definido do seguinte modo:

$$E[f(t)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \beta(t) dt \quad (8)$$

Portanto, o valor esperado de $f(t)$ é a sua média tendo como ponderador a função densidade de probabilidade. Tal conceito é importante para a compreensão das equações mecânicas quando aplicadas a escoamentos turbulentos por usarem em seu desenvolvimento propriedades decorrentes da definição do valor esperado de uma função (Schulz, 1985, 2003; Stanišić, 1985, exemplificam esses desenvolvimentos). As propriedades para o valor esperado de uma função são:

- a) $E[f(t)+g(t)] = E[f(t)]+E[g(t)];$
- b) $E[f(t)a] = aE[f(t)],$ a é uma constante;
- c) $E[E[f(t)]] = E[f(t)];$
- d) $E[E[f(t)]g(t)] = E[f(t)]E[g(t)];$
- e) $E[E[f(t)]E[g(t)]] = E[f(t)]E[g(t)];$
- f) $E[f'(t)] = 0;$
- g) $E[E[f(t)]E[f'(t)]] = 0;$
- h) $E[E[f'(t)]] = 0;$
- i) $E[(\partial f/\partial s)] = \partial(E[f])/ \partial s.$

Essas propriedades são conhecidas como *condições de Reynolds*.

2.3 Modelos de Turbulência

Os modelos de turbulência são propostas que visam a contornar o problema de fechamento, baseando-se em relações para os produtos de flutuações decorrentes da formulação estatística da turbulência, denominadas *tensões de Reynolds* (estatisticamente, são covarianças). Esses modelos geralmente incorporam a hipótese da viscosidade turbulenta de Boussinesq. Essas hipóteses são comumente utilizadas nos modelos *a posteriori*; como já relatado.

A Tabela 1 (adaptado de Lopes Júnior, 2012, p. 16) apresenta uma classificação dos modelos de turbulência segundo o número de equações de transporte utilizadas, com a devida explicação. Evidentemente não há limite para o número de equações adicionais. A Tabela 1 considera os casos mais usuais.

Tabela 1 – Classificação dos modelos *a posteriori* da turbulência

Classificação dos modelos	Descrição
Zero equação	Constituem-se de dois tipos: o primeiro não considera a viscosidade turbulenta e usa relações algébricas com a velocidade para modelar as tensões turbulentas; o segundo baseia-se no <i>comprimento de mistura de Prandtl</i> para modelar a viscosidade turbulenta.
Uma equação	Apresentam uma equação de transporte. Por exemplo, tem-se o modelo <i>k-L</i> , onde <i>k</i> é modelado pela equação de transporte e <i>L</i> é um comprimento característico definido sem equação. Este modelo possui limitações para escoamentos complexos. Tem-se, também, o modelo de Sparlat-Allmaras que resolve uma equação de transporte para uma variável-tipo para a viscosidade turbulenta.
Duas equações	Apresentam duas equações de transporte. Por exemplo, o modelo <i>k-ε</i> (já citado) e o modelo <i>k-ω</i> , que utilizam uma equação de transporte para a energia cinética turbulenta, <i>k</i> , e outra para a taxa de dissipação de energia, <i>ε</i> , ou a frequência turbulenta, <i>ω</i> . Esses modelos são amplamente utilizados e possuem vasta gama de variações.
Seis equações	Apresentam seis equações de transporte para modelar as componentes de tensões do tensor de Reynolds. Nesse caso não se usa a aproximação de Boussinesq, ou seja, não se insere uma viscosidade turbulenta.

2.4 Difusividade Molecular de Massa

O coeficiente de proporcionalidade na lei de Fick, equação (1), é definido como uma propriedade de transporte (ver, Çengel e Ghajar, 2012) chamada de difusividade molecular de massa, como já explanado. Em virtude da natureza complexa da difusão de massa em líquidos, esse coeficiente é quase exclusivamente determinado experimentalmente. Schulz (2003), entre outros, por exemplo, esclarece que o coeficiente de difusividade molecular indica a “facilidade” com que um composto pode avançar através de outro.

No tratamento elementar da difusão é considerada a *difusão comum*, cujo principal mecanismo motriz é representado pelo gradiente de concentração. No entanto, como já aventado, a difusão pode ser causada por vários outros efeitos (gradiente de temperatura, gradiente de pressão, campo de força externa, movimento browniano, *difusão de Knudsen* e difusão de superfície, para citar alguns), tais efeitos, para o trato elementar, são tomados como não relevantes ou inexistentes. A Tabela 2 (adaptada de Çengel e Ghajar, 2012, p. 804) apresenta valores para o coeficiente de difusão através de líquidos, com o propósito de exemplificação.

Tabela 2 – Coeficientes de difusão binária de soluções de líquidos diluídos a 1 atm

Substância A (solutos)	Substância B (solvente)	Temperatura [K]	D_{AB} [m ² /s]
Amônia	Água	285	$1,6 \times 10^{-9}$
Benzeno	Água	293	$1,0 \times 10^{-9}$
Dióxido de carbono	Água	298	$2,0 \times 10^{-9}$
Cloro	Água	285	$1,4 \times 10^{-9}$
Etanol	Água	283	$0,84 \times 10^{-9}$
Glicose	Água	298	$0,69 \times 10^{-9}$
Hidrogênio	Água	298	$6,3 \times 10^{-9}$
Metano	Água	275	$0,85 \times 10^{-9}$
Metanol	Água	288	$1,3 \times 10^{-9}$
Nitrogênio	Água	298	$2,6 \times 10^{-9}$
Oxigênio	Água	298	$2,4 \times 10^{-9}$
Água	Etanol	298	$1,2 \times 10^{-9}$
Água	Metanol	298	$1,8 \times 10^{-9}$
Clorofórmio	Metanol	288	$2,1 \times 10^{-9}$

2.5 Equação da Advecção-Difusão

Segundo Schulz (2003), na área de Fenômenos de Transporte utilizam-se várias equações derivadas do princípio único da conservação de massa. Conforme o tema proposto nesta dissertação, ao se estudar a evolução da concentração de um composto em um escoamento de fluido gera-se uma equação para a evolução desta concentração, ou seja, não é a massa do fluido escoando que será quantificada (o que é tratado pela *equação da continuidade*) e, sim, a massa do composto diluído nesse fluido.

Já foi referido que os fenômenos interfaciais de transporte de massa entre as fases gasosa e líquida são governados pelos mecanismos de difusão molecular e difusão turbulenta, o primeiro se dá em decorrência da agitação molecular e, o segundo, pela agitação de volumes macroscópicos de fluido. A advecção, ou também conhecida como convecção, é o processo de transporte que ocorre devido a um movimento preferencial, e definido, do meio fluido (ÇENGEL E GHAJAR, 2012; SCHULZ, 2003).

De acordo com o princípio da conservação, a variação temporal da massa de um composto no interior de um elemento volumétrico pode ser entendida como igual ao fluxo líquido da massa que atravessa as fronteiras da superfície deste elemento (Çengel e Ghajar, 2012; Schulz, 2003; Sisson e Pitts, 1988, por exemplo) adicionada à quantidade de massa que é gerada ou consumida no interior do elemento. No presente trabalho, entretanto, não se considera geração/consumo de massa. Matematicamente, o princípio de conservação de massa sem fontes e sumidouros pode então ser escrito como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \nabla^2 c + u \nabla c = 0 \quad (9)$$

A equação (9) é a versão da equação da advecção-difusão utilizada neste estudo. O primeiro termo representa a taxa de variação temporal da concentração. O segundo termo representa o fluxo líquido relacionado à difusão molecular e o terceiro termo representa o fluxo líquido relacionado à advecção (onde u representa o vetor velocidade).

É preciso ainda considerar a aplicação da equação (9) aos escoamentos turbulentos. A presença de variáveis instantâneas presentes no equacionamento dificulta sua resolução analítica devido à complexidade dos escoamentos turbulentos (“aleatórios”). As propostas para tratamento dessa equação que geraram resultados aplicáveis, segundo Schulz (2003),

derivaram da ideia básica de “simplificação” do equacionamento através do uso de ferramentas estatísticas. Usando a decomposição de Reynolds, tem-se:

$$u = \bar{u} + u' \quad (10)$$

$$c = \bar{c} + c' \quad (11)$$

Tal procedimento pode não ser adequado para eventos críticos, mas frisa-se que o conhecimento do comportamento médio das grandezas é satisfatório para a solução de muitos problemas na engenharia. Ao substituir as equações (10) e (11) na equação (9) e após alguns algebrismos obtém-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} - D \nabla^2 \bar{c} + \bar{u} \nabla \bar{c} + \nabla (\overline{c' u'}) = 0 \quad (12)$$

Observa-se que a equação (12) contém um termo que envolve o produto de flutuações de velocidade com as flutuações de concentração. Este termo representa a transferência de massa devido ao movimento turbulento. A busca de equações que descrevam o comportamento desses produtos entre dois termos novamente a partir da equação de conservação de massa (único princípio físico até o momento disponível) conduz a correlações de ordens superiores envolvendo produtos médios de mais termos, que caracterizam o problema de fechamento.

A análise proposta neste estudo é, por simplicidade, unidimensional, tomado ao longo do eixo vertical z . É considerado, também, que não há velocidade preferencial definida no seio líquido (uma situação que remete aos dados experimentais analisados no capítulo 4). Portanto, para essas condições se considera que o modelo unidimensional, proposto pela metodologia de OQA, seria adequado para quantificar a reaeração superficial em reservatórios, lagos, lagoas, baías e, eventualmente, em estuários. Não seria, portanto, adequado para aplicação em escoamentos com advecção bem estabelecida, como em rios, córregos e canais em geral. Tais condições levam a seguinte simplificação da equação (12):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} - \overline{c' w'} \right) = 0 \quad (13)$$

Na equação (13), w' representa a flutuação vertical de velocidade. Ressalta-se, obviamente, que é assumida homogeneidade horizontal da concentração para o processo de transferência em análise.

2.6 Camada Limite de Concentração

Para o caso de transferência de massa, a camada limite de concentração se estabelece enquanto há diferença de concentração de um componente dissolvido no fluido entre os contornos e o seio fluido. Frequentemente, a concentração do soluto no solvente (água no caso), na superfície de contorno, é a concentração de saturação para o sistema (Herlina e Jirka, 2008; Janzen et al, 2010, 2011; Schulz e Janzen, 2009, por exemplo). Esta situação é considerada neste trabalho.

A camada limite de concentração é, portanto, a região do perfil de concentração próxima à superfície líquida. É dentro da camada limite de concentração que ocorre a variação da concentração. Tomando a concentração na superfície por C_S e no seio fluido por C_∞ , a região “interna” a estes valores seria idealmente a camada limite.

Segundo Janzen (2006), a definição de uma espessura prática para a camada limite de concentração é arbitrária uma vez que a transição da concentração para o valor C_∞ é assintótica. Na prática, contudo, é justificável a adoção de uma camada limite delimitada, pois o valor de C_∞ é atingido rapidamente (no presente tipo de problemas). Schulz (2003) reproduz a definição da fronteira prática da camada limite de concentração como o lugar geométrico nos quais o valor da concentração c satisfaz a seguinte relação:

$$c - C_S = 0,99(C_\infty - C_S) \quad (14)$$

Nos estudos de transferência interfacial de massa, a difusividade molecular é considerada o mecanismo de transporte mais relevante próximo à superfície, enquanto o transporte turbulento torna-se relevante após essa região (KOMORI et al, 2010). Portanto, é admitido que na camada imediatamente adjacente à superfície da água somente atue a difusão molecular, definida como *camada de difusão molecular*, e, por conseguinte, esta camada possui espessura menor quando comparada à camada limite de concentração, mas evidentemente, encontra-se nela inserida (JANZEN, 2006).

A Figura 1 (adaptada de Janzen, 2006, p. 53) ilustra a variação da concentração próxima à região interfacial.

Figura 1: Variação da concentração próxima à superfície e respectivas camadas de transferência. Adaptada de Janzen (2006)

2.7 Modelos de Transferência Gasosa Interfacial

Os processos físicos atuantes na superfície da água, que são relevantes para a troca de gases na interface ar-água, não são ainda conhecidos em detalhes, tornando-se necessário, assim como ocorre na turbulência, a utilização de modelos. Estes modelos geralmente incorporam conceitos teóricos e empíricos. Esta seção apresenta sucintamente os modelos comumente encontrados na literatura, conforme exposto por Janzen (2006).

2.7.1 Modelo dos Filmes

O modelo dos filmes considera que os efeitos da agitação turbulenta são desprezíveis no interior da camada limite de concentração. Portanto, a difusividade torna-se responsável pelo processo de transferência no interior da camada e, por conseguinte, atua como uma estrutura de “resistência” à transferência de soluto para o seio líquido onde a difusividade turbulenta é

considerada dominante. É, também, admitido haver regime permanente, com consequente perfil de concentração linear no interior da camada limite de concentração. Estas condições levam à definição dos seguintes contornos:

- $c = C_S, z = 0$;
- $c = C_\infty$, em $z = \delta_c$ (espessura da camada limite de concentração).

Estas condições de contorno aplicadas na determinação das constantes de integração quando da integração da seguinte equação básica para o modelo dos filmes:

$$D \frac{d^2 \bar{c}}{dz^2} = 0 \quad (15)$$

levam à seguinte solução:

$$\bar{c} = C_S - \frac{z}{\delta_c} (C_S - C_\infty) \quad (16)$$

Contudo, medidas diretas da espessura do filme (camada limite) laminar são difíceis de obter. Embora valores de espessura medidos existam na literatura (por exemplo, Janzen, 2006), esses não são parâmetros mensuráveis em situações práticas (em rios e oceanos, por exemplo). Dependendo das definições usadas para a espessura (mesmo com dados medidos), tem-se verificado que o modelo fornece valores aquém para a transferência gasosa interfacial (JANZEN, 2006).

2.7.2 Modelos de Renovação Superficial

Os modelos de renovação superficial, ao contrário do modelo dos filmes, consideram a possibilidade dos efeitos da turbulência se estenderem até a camada limite de transferência. Esses modelos sugerem que os turbilhões existentes no seio líquido ocasionam de modo contínuo a ascensão e exposição à fase gasosa de parcelas de líquido e, por conseguinte, descendem parcelas de líquido expostas por certo período de tempo à fase gasosa. No entanto, considera-se que a difusão turbulenta seja desprezível na região próxima à interface. É

admitido que o processo de difusão, segundo as considerações desses modelos, seja descrito pela seguinte equação básica:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + D \frac{d^2 \bar{c}}{dz^2} = 0 \quad (17)$$

As condições de contorno, consideradas nos modelos de renovação superficial, são:

- $c = C_\infty, z > 0, \text{ em } t = 0;$
- $c = C_\infty, z \rightarrow \infty, \text{ em } t > 0;$
- $c = C_S, z = 0, \text{ em } t > 0.$

Com o emprego destas condições de contorno e a solução da equação (17), que pode ser obtida por Transformada de Laplace, encontra-se a seguinte solução:

$$\bar{c} = (C_S - C_\infty) \operatorname{erfc} \left(\frac{z}{\sqrt{4Dt}} \right) + C_\infty \quad (18)$$

Na equação (18), erfc é a função erro complementar. Como cada fração da superfície está exposta à fase gasosa durante diferentes tempos, cada fração possui uma diferente taxa de transferência de gás. Em geral, adota-se um fluxo médio. No entanto, tal consideração leva à necessidade de uma função de distribuição das idades das frações expostas à fase gasosa. Diferentes abordagens são sugeridas quanto a essa função de distribuição das idades, e Janzen (2006) observa que nenhuma das abordagens tradicionais encontradas na literatura procurou relacionar a função de distribuição das idades à mecânica do escoamento. Torna-se, portanto, necessário que os modelos de renovação envolvam parâmetros segundo considerações físicas adicionais ou parâmetros determinados experimentalmente.

2.7.3 Modelos dos Filmes e Renovação Combinados

Sabe-se que no seio líquido a difusão turbulenta é mais intensa do que a difusão molecular, sendo os efeitos desta última desprezados. Porém, junto à interface, a difusão molecular é o principal mecanismo de transporte, o que considera que a difusão turbulenta seja aproximadamente nula. Os modelos dos filmes e renovação combinados, também

conhecidos como modelos unificados, admitem a existência de um filme líquido na superfície, em cujo interior as frações líquidas são continuamente repostos pela turbulência do seio líquido. A permanência dessas frações líquidas no aludido filme garante a transferência gasosa através da difusão molecular. Sendo a difusão turbulenta desprezada na região próxima à interface, a equação que representa essas condições é a mesma expressada pela equação (17). As condições de contorno empregadas agora são:

- $c = C_\infty, z > 0, \text{ em } t = 0;$
- $c = C_\infty, z = \delta_c, \text{ em } t > 0;$
- $c = C_S, z = 0, \text{ em } t > 0.$

A solução da equação (17), com as condições de contorno mencionadas, é:

$$\bar{c} = C_\infty + (C_S - C_\infty) \sum_{n=0}^{\infty} \left(\operatorname{erfc} \frac{n+1 - \frac{z}{2\delta_c}}{\sqrt{\frac{Dt}{\delta_c^2}}} - \operatorname{erfc} \frac{n + \frac{z}{2\delta_c}}{\sqrt{\frac{Dt}{\delta_c^2}}} \right) \quad (19)$$

Onde erfc é a função erro complementar. Novamente são adotadas diferentes abordagens para análise da função de distribuição de idades, tais abordagens consideram uma taxa de renovação, que quando pequena (para pequenas agitações), torna a solução próxima à solução para o modelo dos filmes.

2.7.4 Modelos de Difusão Turbulenta

Nos modelos de difusão turbulenta, o transporte de massa na região próxima à interface é devido à difusão molecular e, também, à difusão turbulenta. A equação básica para esses modelos, portanto, é igual àquela descrita pela equação (13) (observe o leitor que essa equação representa o problema de transporte em estudo nesta dissertação). Os modelos de difusão consideram que o processo de difusão turbulenta seja análogo ao da difusão molecular. Portanto, a equação (13) torna-se:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + D_t \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) = 0 \quad (20)$$

Onde

$$-\overline{c'w'} = D_t \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (21)$$

Observa-se que desta forma o comportamento agitado do meio líquido determina a ordem de grandeza das parcelas de difusividade molecular e turbulenta. Para movimentos lentos, tem-se a prevalência dos efeitos moleculares e o termo de difusão turbulenta pode ser desprezado. Para movimentos intensos, a difusividade turbulenta prevalece e o termo de difusão molecular pouco atua na quantificação do processo de transferência. Geralmente admite-se que a difusividade turbulenta apresenta uma variação da forma:

$$D_t = az^q \quad (22)$$

a e q são constantes. O valor do expoente do parâmetro de comprimento z possui diversos valores apontados na literatura e constitui-se ainda em assunto de discussão perante a correta compreensão do processo de transferência interfacial de gases. Para exemplificação, a Tabela 3 (adaptado de Janzen, 2006, p. 64) demonstra os valores da constante q , segundo certas condições, sugeridos na literatura. Uma extensão à equação (22) foi apresentada por Janzen, Schulz e Jirka (2011), na forma:

$$D_t = az^q + bz^{q+1} \quad (22a)$$

Tabela 3 – Valores propostos de q para modelos de difusão turbulenta

Autores	q	Condição
Kishinevsky e Serebriansky	0	Altas agitações
Schulz e Schulz	1	Superfícies livres
Coantic	2	Superfícies livres
Coantic	3	Superfícies rígidas
Ueda	3	Superfícies livres
Janzen, Schulz e Jirka	3 ($q+1$)=4	Superfícies livres, equação (22a)

Uma discussão fortemente fundamentada nas características dos produtos estatísticos junto a superfícies foi feita pelos autores citados, mostrando quais as implicações que podem haver utilizando os valores 2 e 3 para o expoente q . Expansões em série dos produtos estatísticos foram feitas, em conformidade com as teorias estatísticas clássicas. Considerando a

aproximação exponencial para o perfil de concentrações, conforme sugerido por Chu e Jirka (2003), por exemplo, Janzen, Schulz e Jirka (2011) demonstraram que a solução $q=2$ não é possível e que a solução $q=3$ (na equação (22a)) é aquela que melhor reproduz os dados experimentais que os autores obtiveram. Este valor de q também está indicado na Tabela 3, juntamente com o valor de $q+1$, com a ressalva de se reporta à equação (22a). A equação (22a) é uma extensão adequada ao “modelo dos pequenos turbilhões” muito adotado na literatura, a qual permite explicar muitos aspectos da evolução dos perfis turbulentos imediatamente abaixo da interface ar-água. O estudo de Janzen, Schulz e Jirka (2011) é talvez aquele que tenha permitido que uma maior quantidade de variáveis estatísticas e físicas presentes nos fenômenos interfaciais pudesse ser reproduzida e explicada por um modelo de difusividade turbulenta. Em se verificando a sua adequação e conveniência preditiva, vale a pena utilizá-lo como ferramenta de engenharia.

2.8 Método OQA

2.8.1 Princípio e Desenvolvimento

Schulz (1985) baseado nas hipóteses comumente utilizadas nos modelos de reoxigenação da água, como a admissão de que a concentração na superfície da água é igual à de saturação, de que a difusão molecular é responsável pela incorporação do oxigênio à água na região junto à superfície, de que a concentração de oxigênio no meio turbulento abaixo da camada limite de concentração é homogênea, e por último, de que a turbulência na região próxima à superfície pode ser considerada isotrópica quando em escoamentos com lâmina de água suficientemente profunda, sugeriu um esquema para a variação da concentração de um ponto próximo à superfície conforme o desenvolvimento temporal de uma onda quadrada de formato bimodal com largura de banda variável (ou seja, aleatória). Tal análise possuiu por justificativa a idealização de um modelo no qual as flutuações de concentração contivessem informação acerca da concentração média esperada, uma vez que o primeiro e o segundo modelo de Corrsin (aplicados a misturadores isotrópicos), em análise pelo referido autor, expressam a variação do *grau de segregação* no tempo e o mesmo não recebe informação do

escoamento médio no qual se encontra inserido. Bradshaw (1976 apud SCHULZ, 1985, p. 141) explica que um determinado ponto espacial-temporal não recebe informações sobre valores médios dependentes de grandes distâncias e tempos, quando da divisão convencional de uma grandeza aleatória em componentes média e de flutuação.¹ O esquema sugerido para a variação de concentração é apresentado pela Figura 2.

Figura 2: Variação de concentração segundo uma onda quadrada aleatória em um ponto próximo à superfície

A região junto à superfície foi tratada como uma região de intermitência quanto à concentração, Schulz (1985) definiu que os turbilhões com movimentos ascendentes possuem a concentração do meio (C_∞) enquanto os descendentes possuem parte de seu volume com a concentração de saturação (C_s). O referido autor menciona que a divisão entre “uma região de intermitência para a concentração e uma região de concentração uniforme é irreal e foi feita apenas por ser conveniente para o uso do equacionamento válido para a turbulência isotrópica”.

Com deduções matemáticas advindas da esquematização adotada somadas àquelas disponibilizadas em assuntos correlatos na literatura, Schulz (1985) procurou fazer analogias entre o transporte de diferentes grandezas físicas junto à superfície ar-água, para o que se valeu da dissolução de uma onda sólida solúvel. Essa onda foi quantificada por um assim denominado “modelo cúbico de dissolução”, possuindo um parâmetro de desgaste ou dissolução que foi correlacionado com o *coeficiente de reoxigenação* de um corpo de água,

¹ BRADSHAW, P., ed. *Turbulence*. Springer-Verlag, Topics in Applied Physics Volume 12, Berlin, 1976.

obtido através da análise temporal da *taxa de reoxigenação*, que é proporcional ao déficit de concentração de oxigênio em relação à concentração de saturação. O estudo referido possibilitou desenvolver um modelo que retrata o comportamento do *coeficiente de reoxigenação* com diferentes parâmetros observados qualitativamente frente aos disponíveis na literatura, em especial a potência de dissipação de energia e a *escala de segregação* (uma escala de comprimento para as grandezas escalares em escoamentos turbulentos). Posteriormente, Schulz (1989a, 1990b) procurou examinar a relação sugerida para a quantificação do coeficiente de reoxigenação com a dissipação de energia que ocorre no meio líquido, e pôde verificar que os processos de transferência de massa, quando em fluidos em agitação turbulenta, podem de fato seguir o equacionamento sugerido. Um resumo da proposta e os resultados destes trabalhos podem ser apreciados em Schulz (1989b).

Em acordo ao esquema ilustrado pela Figura 2 a informação acerca da concentração no meio é estabelecida pela fração de tempo n em que houve concentração C_S em um ponto inserido na região de intermitência, o que permite expressar:

$$n = \frac{(\text{tempo com } C_S)}{(\text{tempo de medição})} \quad (23)$$

Consequentemente, a concentração média $\bar{c}$ é definida como:

$$\bar{c} = nC_S + (1 - n)C_\infty \quad (24)$$

Onde

$$(1 - n) = \frac{(\text{tempo com } C_\infty)}{(\text{tempo de medição})} \quad (25)$$

Os trabalhos desenvolvidos por Schulz (1985) e Schulz e Schulz (1991) possibilitaram a predição dos perfis da raiz quadrada da média (RMS - *root mean square*) das flutuações de concentração a partir da “modelação” proposta por onda quadrada aleatória. Os efeitos da difusividade molecular não foram considerados nessas tentativas iniciais. Para sistemas altamente agitados, o *coeficiente de transferência global* (que traz informações sobre a fase líquida e gasosa, considerando um coeficiente de transferência para a fase líquida e um para a fase gasosa) não depende da difusividade molecular do gás no líquido (SCHULZ, 1990a, 1990c).

Janzen (2006) aplicou a “modelação” com ondas quadradas aleatórias para o estudo de transferência de massa na interface ar-água em um tanque de grade oscilante. O referido autor utilizou as técnicas de *Particle Image Velocimetry* (PIV) e *Laser Induced Fluorescence* (LIF) para realizar suas medições experimentais e comparou seus resultados com as previsões de Schulz e Schulz (1991), obtendo boa concordância.

Schulz e Janzen (2009), considerando os efeitos da difusividade, expandiram a descrição realizada por Schulz e Schulz (1991). A difusividade ocasiona um efeito de redução na amplitude do sinal da onda quadrada aleatória devido ao resultado da troca de massa entre pequenos volumes de fluido com diferentes concentrações. Tal efeito ocasiona um abatimento no valor da flutuação de concentração acima da média e um incremento no valor da flutuação de concentração abaixo da média. A Figura 3 ilustra as flutuações de concentração de oxigênio mensuradas por Janzen (2006), a qual denota que a amplitude de oscilações é sempre inferior à $C_S - C_\infty$ (neste caso C_∞ representa uma concentração inferior e a definição prática da camada limite de concentração é utilizada).

Figura 3: Flutuações de concentração de oxigênio em experimentos com tanque de grades oscilantes. Adaptada de Janzen (2006)

O esquema da Figura 2 é agora definido como se segue na Figura 4. A redução do valor máximo de concentração é representada por $(C_S - P)$ e o incremento do valor mínimo por $(C_\infty + N)$. Os valores de P e N são dependentes da posição ao longo do eixo vertical z .

Figura 4: Desenvolvimento temporal da concentração, considerando uma redução P para C_s e um incremento N para C_∞

A conservação de massa, em se mantendo a média da concentração, leva à seguinte relação entre P e N :

$$N = \frac{Pn}{(1 - n)} \quad (26)$$

Observe que este procedimento mantém válida a relação expressa pela equação (24).

A apresentação das formulações paramétricas advindas das considerações expostas foi suprimida propositalmente até este ponto da dissertação para serem abordadas, de forma mais adequada, na próxima subseção. Schulz et al (2011b) apresentaram a metodologia de ondas quadradas aleatórias para um problema de transporte unidimensional de massa na interface ar-água considerando a abordagem *a priori*, na qual os parâmetros estatísticos foram definidos através das funções de *partição*, *redução* e *superposição*. As flutuações de velocidade e concentração foram “modeladas” segundo ondas quadradas aleatórias. Uma extensão do método OQA é apresentada em Schulz et al (2011a), na qual as funções mencionadas foram empregadas para quantificar o transporte de um escalar em geral que se apresente sob um fenômeno com características oscilatórias. A segunda referência mencionada também possui uma diferença na formulação que quantifica n (da primeira referência), conforme comentado por Lopes Júnior (2012), que reside em um procedimento algébrico que se mostrou inadequado.

Para concluir as ideias estabelecidas nesta subseção, vale ressaltar que a simplificação de análise de fenômenos com característica oscilatórias através de uma onda quadrada é também considerada por outros autores em suas respectivas áreas de investigação. Por exemplo, na “visão” da mecânica quântica, uma onda quadrada com diferentes valores modais é utilizada

para representar valores discretos das flutuações de pressão quando da interpretação microscópica de uma medição macroscópica de pressão em modelos moleculares para fluidos, uma vez que variáveis dinâmicas em diferentes estados quânticos podem assumir valores discretos em subsequentes passos de tempo (LUCAS, 2007). Pope (2000) também faz alusão à esquematização de variáveis aleatórias através de sinais quadrados, considerado pelo autor referido como um “processo de salto” que possibilita representar um espectro semelhante ao de um mensurado registro temporal de uma variável em estudo.

2.8.2 Método OQA Aplicado ao Transporte Unidimensional Interfacial Turbulento de Massa

O desenvolvimento da presente subseção segue o equacionamento estatístico exposto em Schulz et al (2011a, 2011b). Adicionalmente, menciona-se o trabalho de Lopes Júnior (2012), que organizou as deduções detalhadamente em língua portuguesa, uma vez que as referências anteriores estavam escritas em língua inglesa. O método OQA é utilizado no sentido de se obter a definição de grandezas envolvidas no transporte interfacial em análise e gerar relações entre as mesmas. O método objetiva também, como já referido na seção introdutória desta dissertação, possibilitar o fechamento do equacionamento estatístico, contornando assim o problema de fechamento característico do equacionamento estatístico governante de fenômenos oscilatórios.

O transporte unidimensional de massa em estudo é expresso conforme a equação (13) (descrita na seção 2.5). Esta equação envolve duas variáveis, a concentração média e a média do produto das flutuações de concentração e de velocidade, portanto uma equação adicional é necessária para o fechamento do equacionamento. Porém, novas equações estatísticas levam a novas relações estatísticas desconhecidas, como se infere da relação expressa pela equação (7). Uma vez que não serão consideradas hipóteses *a posteriori* (heurísticas, por exemplo) para análise dos termos desconhecidos, torna-se adequada a obtenção de uma equação adicional. Esta nova equação utiliza-se da grandeza estatística dos momentos centrais para a flutuação de concentração, como se segue:

$$\overline{c'^{\theta}} = \overline{[c - \bar{c}]^{\theta}} \quad (27)$$

A equação adicional é desenvolvida através da operação de média aplicada sobre o produto da equação (9) com a flutuação instantânea de concentração elevada a uma potência θ . Tal procedimento segue os passos tradicionais da Mecânica dos Fluidos Estatística, como descritos, por exemplo, em Monin e Yaglom (2007). A equação obtida é:

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \overline{c'^\theta}}{\partial t} + \frac{\overline{c'^{\theta-1}}}{c'^{\theta-1}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\overline{w' c'^{\theta-1}}}{w' c'^{\theta-1}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \overline{w' c'^\theta}}{\partial z} = D \left(\frac{\overline{c'^{\theta-1}}}{c'^{\theta-1}} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \frac{\overline{c'^{\theta-1}}}{c'^{\theta-1}} \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right) \quad (28)$$

Na equação (28), θ é um número puro, que representa uma ordem qualquer do balanço estatístico (observe que $\theta=1$ reproduz a equação (13)). A obtenção da equação (28) é apresentada no Apêndice A.

A equação (28) envolve os termos da equação (13), porém apresenta três novas relações estatísticas. Contudo, quando nela é aplicada a metodologia das OQAs, devido à definição *a priori* do número total de parâmetros básicos para adequar o sinal às ondas quadradas, tem-se um número limitado de equações a serem utilizadas. Esta é a vantagem explorada no estudo da turbulência a partir da metodologia das OQAs, ou seja, o implícito fechamento de um conjunto de equações estatísticas.

A transferência de massa na interface ar-água no sentido do seio líquido e ao longo de um eixo vertical z , quantificada a partir do perfil de concentração que apresenta oscilações como as mostradas pela Figura 5 (adaptado de Schulz et al, 2011a), pode servir de base de exemplificação para a aplicação das OQAs.

Figura 5: Perfil de concentração c oscilando entre as funções $C_s(t)$ e $C_\infty(t)$.
Adaptado de Schulz et al (2011a)

As oscilações de concentração c variam entre uma função temporal de concentração superior $C_S(t)$ e uma função temporal de concentração inferior $C_\infty(t)$. A turbulência é assumida estacionária.

No transporte em análise, a região interfacial pode ser compreendida como inserida na fase líquida, enquanto que a fase gasosa impõe as condições de contorno. Neste caso, a concentração de saturação é assumida prevalecente na superfície e a transferência de massa é governada por um conjunto de mecanismos de difusão molecular e transporte turbulento na fase líquida (SCHULZ E JANZEN, 2009). De acordo com os resultados experimentais de Janzen (2006) e Herlina e Jirka (2008) para o fluxo molecular e turbulento de oxigênio, por exemplo, pode-se assumir que existe uma estrutura interfacial constituída de pelo menos duas camadas com diferentes relevantes mecanismos para o transporte de massa. Assim, é usual assumir que a difusividade molecular é o mecanismo de transporte mais relevante próximo à superfície, enquanto o transporte turbulento torna-se relevante abaixo dessa região.

O método OQA permite “modelar” o registro das oscilações de um escalar ao longo do tempo para uma posição $z_1 < z < z_2$. Em outras palavras, a onda quadrada aleatória bimodal é utilizada com o intuito de simplificar a representação das oscilações de concentração, conforme esquematizado na Figura 6 (adaptado de Schulz et al, 2011b).

Figura 6: Representação da concentração c no tempo simplificada em uma onda quadrada aleatória bimodal. Adaptado de Schulz et al (2011b)

Observa-se na Figura 6 que a onda quadrada alterna sua amplitude de forma irregular e instantaneamente entre os dois níveis de concentração, sem incluir qualquer valor intermediário, nem o valor médio de concentração indicado na figura.

Conforme proposta dos autores mencionados no início desta subseção, foi formulado um número definido de funções paramétricas destacadas a seguir:

2.8.2.1 Função de Partição

A função de partição é uma ponderação utilizada para exprimir a parcela de tempo em que as oscilações de concentração se encontram com valores superiores à média da concentração. A equação (23) representa esta definição, portanto, n representa a função de partição.

As áreas superior e inferior das oscilações esquematizadas na Figura 4, em relação à média, são iguais. Sendo assim, as operações de soma e média das oscilações resultam nulas, o que permite expressar:

$$N\Delta t_{C_{\infty}+N} = P\Delta t_{C_s-P} \quad (29)$$

Conforme apresentado pela equação (24), a função de partição n auxilia na obtenção da concentração média $\bar{c}$. A obtenção de qualquer outra grandeza média segue o procedimento exposto. Cada grandeza adicional possui sua própria função de partição, uma vez que é conhecido que as oscilações das grandezas não são coincidentes no tempo. Para o transporte em análise neste estudo, será considerada uma função de partição n para as flutuações de concentração, e uma função de partição m para as flutuações de velocidade.

Note que a divisão da equação (29) pelo tempo total de observação resulta na equação (26).

Com base na equação (24) tem-se como solução para n :

$$n = \frac{\bar{c} - C_{\infty}}{C_s - C_{\infty}} \quad (30)$$

Observa-se pela equação (30) que o perfil da função de partição expressa o perfil normalizado da concentração.

2.8.2.2 Função Coeficiente de Redução

A amplitude das flutuações superiores à média é reduzida pela parcela P (Figura 4). Um coeficiente de redução, designado por α , é empregado para minorar a amplitude máxima destas oscilações e, por conseguinte, define a variável P como se segue:

$$P = \alpha(C_s - \bar{c}) \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (31)$$

O coeficiente de redução α é uma função da posição ao longo do eixo vertical z . Valores de α próximos de 1 ou 0 indicam grande ou pequena influência da difusão molecular, respectivamente. Para valores de α próximo de 1 tem-se uma menor amplitude de oscilação, o que infere, na posição imediatamente próxima à superfície, um menor efeito de turbulência. Se α atingir o seu valor máximo (no extremo superior da camada limite de transferência) indicará uma transferência exclusivamente difusiva. Por outro lado, a função de redução irá tender a um valor próximo a 0 quando houver uma transferência preferencialmente turbulenta. Isto ocorre em uma posição intermediária entre a superfície e o seio líquido distante. Fisicamente, parcela de líquidos com concentrações de massa altas e baixas respectivamente descem e sobem através dessa posição intermediária devido aos movimentos turbulentos, sem que a difusão molecular tenha tido tempo de agir integralmente sobre as parcelas de líquido para efetuar a homogeneização. Finalmente, mais distante da superfície, indo ao seio do líquido, a mistura turbulenta ocorre e a difusão molecular se efetua em um tempo suficientemente longo, de modo que suprime as diferenças de concentração, fazendo com que α novamente tende ao valor unitário. Assim, α é próximo à unidade junto à interface porque a turbulência é suprimida nessa região, havendo preferencialmente o transporte molecular. Por outro lado, α é próximo à unidade no seio fluido porque há tempo suficiente para que a difusão molecular homogeneíze a concentração. Finalmente, α se afasta da unidade (se aproxima de zero) em uma posição intermediária porque não há tempo para que a difusão molecular homogeneíze as parcelas com diferentes concentrações em trânsito tipo “contra-corrente” nessa região.

Perfis experimentais de α , na camada limite prática de concentração, foram obtidos por Schulz e Janzen (2009) para a transferência de massa na interface ar-água. Segundo os resultados obtidos por estes autores, valores de α próximos de 1 ocorriam nos limites da camada limite prática de concentração, enquanto valores próximos de 0 ocorriam na região intermediária da mesma. Os resultados, portanto, são concordantes com a definição teórica do coeficiente de redução α .

Utilizando as equações (24), (30) e (31) pode-se definir as parcelas P e N como a seguir:

$$\left. \begin{aligned} P &= \alpha(1 - n)(C_s - C_\infty) \\ N &= \alpha n(C_s - C_\infty) \end{aligned} \right\} \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (32)$$

2.8.2.3 Função Coeficiente de Superposição e Correlação Entre Velocidade e Concentração

No processo de transferência em estudo há duas grandezas que devem ser consideradas, a concentração e a velocidade. Sabe-se que essas grandezas oscilam simultaneamente no intervalo $z_1 < z < z_2$ da Figura 5. A função coeficiente de correlação, $r(z)$, das flutuações de velocidade e concentração é dada por:

$$r(z) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} r(z, t) dt = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_1}^{t_2} \frac{w'c'}{\sqrt{w'^2} \sqrt{c'^2}} dt = \frac{\overline{w'c'}}{\sqrt{\overline{w'^2}} \sqrt{\overline{c'^2}}} \quad (33)$$

O coeficiente de correlação representa o fluxo turbulento de massa normalizado com os valores RMS das flutuações de concentração e de velocidade. Como as flutuações são geradas pela mesma causa, espera-se que os registros das flutuações de velocidade e de concentração sejam, pelo menos, parcialmente sobrepostos. As flutuações de concentração guardam relação para com as flutuações da velocidade vertical. Logo, torna-se importante considerar a relação de sobreposição dessas duas grandezas para a compreensão do processo de transferência.

As oscilações verticais de velocidade podem ser positivas (w'_1) ou negativas (w'_2); e, como já referido anteriormente, uma função de partição m é utilizada para representá-las.

Uma sobreposição perfeita pode ser expressa como sendo $n = m$, contudo esta consideração não é usual. Para a representação adequada de todos os casos de superposição será considerado um coeficiente de superposição $0 \leq \beta \leq 1$ (função de z e apreendido sobre um tempo normalizado), cujo valor igual a 1 implica em $m = n$ e, igual a 0, em $m = (1-n)$ (que expressa uma sobreposição inversa). A Figura 7 (adaptado de Schulz et al, 2011a) ilustra um esquema proposto para elucidação da justaposição das flutuações.

c'_1 e c'_2 representam as flutuações de concentração superior e inferior à média de concentração, respectivamente.

Em analogia à definição da função de partição n e utilizando-se do esquema apresentado na Figura 7, a função de partição m pode ser definida como se segue:

$$m = 1 - (\beta + n - 2\beta n) \quad (34)$$

Figura 7: Flutuações de concentração e velocidade justapostas. Adaptado de Schulz et al (2011a)

Apresentadas as funções, adotadas *a priori*, que objetivam a parametrização das grandezas estatísticas inerentes ao problema de transporte em análise, seguem-se as definições paramétricas destas grandezas nas subseções seguintes. É importante notar que o processo de parametrização adotado permite definir cada grandeza estatística em separado e posteriormente uni-las nas equações de origem. Em segundo lugar, é importante observar que essas funções foram definidas objetivando obter o comportamento médio do registro temporal original. Dessa forma, tais funções envolvem os ajustes efetuados para que este objetivo seja alcançado. Finalmente, essas funções não introduzem princípios *ad hoc*, como o exemplo da conversão de uma covariância em um produto de um gradiente médio e um coeficiente por definir, mas apenas repousam em definições que são possíveis de acompanhar fisicamente e matematicamente. Trata-se, portanto, de um novo paradigma no tratamento de sinais “tipo” aleatório, que usa simplificações cuja compreensão é mais tangível do que aquelas perpetradas nos modelos *a posteriori*.

2.8.2.4 Flutuações de Concentração em Torno da Média

As oscilações de concentração em torno da média podem ser definidas segundo as equações (24), (31) e (32), as quais permitem obter:

$$c'_1 = (C_s - P - \bar{c}) = (1 - n)(C_s - C_\infty)(1 - \alpha) \quad (35)$$

$$c'_2 = (C_\infty + N - \bar{c}) = -n(C_s - C_\infty)(1 - \alpha) \quad (36)$$

2.8.2.5 Flutuações de Velocidade e RMS de Velocidade

Os efeitos de turbulência, para o caso unidimensional sem movimento preferencial de velocidade, dependem unicamente das flutuações de velocidade. Nestas condições é usual a utilização do RMS de velocidade $\sqrt{w'^2}$ como uma escala referente de velocidade. Em acordo ao que já foi exposto, as flutuações de velocidade seguem a simplificação proposta por ondas quadradas aleatórias sendo sua amplitude função da posição ao longo do eixo vertical z . Para a obtenção das flutuações de velocidade e do valor RMS de velocidade torna-se necessário a utilização de uma velocidade auxiliar U , exemplificada pela Figura 8 (adaptado de Schulz et al, 2011a).

Figura 8: Função partição de velocidade m e escala de velocidade U . Adaptado de Schulz et al (2011a)

Pode-se definir a escala de velocidade auxiliar U da seguinte forma:

$$U = w'_1 m \quad e \quad U = -w'_2 (1 - m) \quad (37)$$

A velocidade média é nula, conforme expresso na equação (38):

$$w'_1 m + w'_2 (1 - m) = 0 \quad (38)$$

A velocidade auxiliar U é, também, função do eixo vertical z . O RMS de velocidade pode ser definido como se segue:

$$\sqrt{w'^2} = \sqrt{mw'^1{}^2 + (1 - m)w'^2{}^2} \quad (39)$$

Assim, utilizando as equações (34), (37) e (39), pode-se escrever para a velocidade auxiliar U :

$$U = \sqrt{w'^2} \sqrt{[1 - (\beta + n - 2\beta n)](\beta + n - 2\beta n)} \quad (40)$$

Com as equações (34), (37) e (40) obtêm-se as flutuações superior e inferior de velocidade:

$$w'_1 = \sqrt{w'^2} \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} \quad \text{e} \quad w'_2 = -\sqrt{w'^2} \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} \quad (41)$$

O RMS de velocidade é, também, função da posição ao longo do eixo vertical z e é utilizado junto às funções básicas n , α e β para o cálculo dos termos estatísticos. O valor do RMS de velocidade é nulo na superfície da água e constante no seio líquido ($z \rightarrow \infty$) no processo de transferência em análise.

2.8.2.6 Momentos Centrais das Flutuações de Concentração

A equação (27) define os momentos centrais das flutuações de concentração, onde θ é a ordem do momento (ou da equação de balanço para o momento em questão). Utilizando-se das equações (35) e (36) e a função de partição n é possível definir os momentos centrais das flutuações de velocidade da seguinte forma:

$$\overline{c'^\theta} = c'_1{}^\theta n + c'_2{}^\theta (1 - n) = n(1 - n)[(1 - n)^{\theta-1} + (-1)^\theta n^{\theta-1}](C_s - C_\infty)^\theta (1 - \alpha)^\theta \quad (42)$$

2.8.2.7 Fluxo Turbulento de Massa

O fluxo turbulento de massa é definido pela operação de média aplicada sobre o produto das oscilações de velocidade e de concentração. O fluxo turbulento de massa pode ser quantificado, segundo o presente método, através das combinações dos produtos entre as oscilações de velocidade e de concentração ponderadas com suas respectivas funções de partição. Generalizando para qualquer ordem de potência θ para as flutuações de concentração, tem-se:

$$\overline{w'c'^\theta} = w'_1[c'_1{}^\theta n\beta + c'_2{}^\theta (1 - n)(1 - \beta)] + w'_2[c'_1{}^\theta n(1 - \beta) + c'_2{}^\theta (1 - n)\beta] \quad (43)$$

A Figura 7 pode ser utilizada para construir com mais facilidade a equação (43). Considerando a equação (41) aplicada à equação (43) tem-se o fluxo turbulento geral de massa e das suas flutuações de ordem superior expressos conjuntamente como:

$$\begin{aligned} \overline{w'c'^\theta} = n(1 - n)(1 - \alpha)^\theta (C_s - C_\infty)^\theta \sqrt{\overline{w'^2}} & \\ \left\{ \sqrt{\frac{\beta + n - 2\beta n}{1 - (\beta + n - 2\beta n)}} [(1 - n)^{\theta-1}\beta + (-1)^\theta n^{\theta-1}(1 - \beta)] \right. & \\ \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta + n - 2\beta n)}{\beta + n - 2\beta n}} [(1 - n)^{\theta-1}(1 - \beta) + (-1)^\theta n^{\theta-1}\beta] \right\} & \end{aligned} \quad (44)$$

Note-se que as grandezas estatísticas permitem definir o fluxo turbulento de massa com o auxílio da equação de conservação de massa (com sentido físico). Os fluxos das grandezas de ordem superior (isto é, $\theta \neq 1$) não possuem ainda significados físicos claros, uma vez que repousam sobre a quantificação da evolução de grandezas estatísticas de menor ordem, mas também não identificadas imediatamente com variáveis físicas.

2.8.2.8 Derivadas de Variáveis Médias

As equações governantes (13) e (28) envolvem termos com derivadas de variáveis médias. Estes termos também são parametrizados em conformidade com as funções e consequentes definições do método OQA.

Com base na equação (24), a p -ésima ordem da derivada espacial da concentração média é definida como:

$$\frac{\partial^p \bar{c}}{\partial z^p} = (C_s - C_\infty) \frac{\partial^p n}{\partial z^p} \quad (45)$$

A derivada temporal é descrita, de forma empírica, análoga à lei de resfriamento de Newton, ou seja, a taxa de variação temporal é proporcional ao déficit de concentração, o que permite expressar:

$$\frac{\partial C_\infty}{\partial t} = K(C_s - C_\infty) \quad (46)$$

Na equação (46), K [1/s] é um coeficiente de transferência de massa. Observe que a equação (46) representa a taxa de “crescimento” da concentração inferior da região de transferência ao longo do tempo, em outras palavras, a transferência de massa é encerrada quando a concentração do seio líquido iguala-se à concentração da superfície, portanto, nesta situação não haverá mais o gradiente de concentração que impulsionava o processo de transferência. Esta forma de quantificação da variação temporal foi escolhida nas primeiras análises das OQAs porque o fenômeno físico estudado envolve a acumulação de massa (oxigênio) em um volume de água fixo e delimitado por um tanque. Em não havendo variação temporal, a derivada é nula (mas não aplicável ao caso em estudo). O princípio da equação (46) é utilizado para a definição das derivadas temporais da concentração média e das flutuações de concentração a um expoente θ qualquer, utilizando também as equações (24) e (42). As derivadas temporais ficam assim definidas:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = \frac{\partial [nC_s + (1 - n)C_\infty]}{\partial t} = K(1 - n)(C_s - C_\infty) \quad (47)$$

$$\frac{\partial \overline{c'^\theta}}{\partial t} = -\theta K n (1-n) [(1-n)^{\theta-1} + (-1)^\theta n^{\theta-1}] (C_s - C_\infty)^\theta (1-\alpha)^\theta \quad (48)$$

Falta considerar, por último, a parcela da equação (28) que envolve o produto entre flutuações e a derivada espacial das flutuações de concentração. Utilizando as equações (35) e (36), têm-se as seguintes expressões:

$$c'_1{}^\theta \frac{\partial^2 c'_1}{\partial z^2} = [(1-n)(C_s - C_\infty)(1-\alpha)]^\theta \frac{\partial^2 [(1-n)(1-\alpha)]}{\partial z^2} (C_s - C_\infty) \quad (49)$$

$$c'_2{}^\theta \frac{\partial^2 c'_2}{\partial z^2} = [-n(C_s - C_\infty)(1-\alpha)]^\theta \frac{\partial^2 [-n(1-\alpha)]}{\partial z^2} (C_s - C_\infty) \quad (50)$$

Com o auxílio da função de partição n , pode-se obter a média desse produto, conforme expresso pela equação (51).

$$\overline{c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2}} = \left\{ (1-n)^{\theta-1} \frac{\partial^2 [(1-n)(1-\alpha)]}{\partial z^2} + (-n)^{\theta-1} \frac{\partial^2 [-n(1-\alpha)]}{\partial z^2} \right\} n(1-n)(1-\alpha)^\theta (C_s - C_\infty)^{\theta+1} \quad (51)$$

Todos os detalhes das deduções das equações apresentadas na subseção 2.8.2 (itens 4 a 7) podem ser encontradas em Lopes Júnior (2012).

2.8.2.9 Equações de Conservação de Massa Expressas em Parâmetros do Método OQA

As definições paramétricas encontradas para as relações estatísticas são unificadas nas equações governantes (equações (13) e (28)) do processo de transporte em análise. As equações resultantes são não lineares, uma vez que a relação entre as variáveis estatísticas e os parâmetros básicos adotados na metodologia de OQA resulta não linear.

A equação (13), utilizando-se das equações (24), (44), (45) e (47), expressa segundo parâmetros do método OQA, apresenta-se como:

$$K(1-n) = D \frac{d^2 n}{dz^2} - \frac{d}{dz} \left\{ \frac{n(1-n)(1-\alpha)\sqrt{w'^2}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(2\beta-1)^2}}} \right\} \quad (52)$$

Por sua vez, a equação (28), utilizando-se das equações (24), (42), (45), (48) e (51), é expressa como:

$$\begin{aligned} & -Kn(1-n)[(1-n)^{\theta-1} + (-1)^\theta n^{\theta-1}](1-\alpha)^\theta \\ & + \frac{n(1-n)}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(2\beta-1)^2}}} [(1-n)^{\theta-1} - (-n)^{\theta-1}](1-\alpha)^{\theta-1} \sqrt{w'^2} \frac{\partial n}{\partial z} \\ & + \frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \frac{n(1-n)}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(2\beta-1)^2}}} [(1-n)^\theta - (-n)^\theta](1-\alpha)^\theta \sqrt{w'^2} \right\} \quad (53) \\ & = Dn(1-n)[(1-n)^{\theta-2} + (-1)^{\theta-1} n^{\theta-2}](1-\alpha)^{\theta-1} \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \\ & + D \left\{ (1-n)^{\theta-2} \frac{\partial^2 [(1-n)(1-\alpha)]}{\partial z^2} + (-n)^{\theta-2} \frac{\partial^2 [-n(1-\alpha)]}{\partial z^2} \right\} n(1-n)(1-\alpha)^{\theta-1} \end{aligned}$$

2.8.3 Caso Simplificado de Transferência Unidimensional Turbulenta de Massa Segundo o Método OQA

Conforme exposto na introdução desta dissertação, a linha de pesquisa à qual o presente estudo se vincula busca analisar os aspectos e a abrangência de uma metodologia de análise de sinais “tipo” aleatórios, tendo este estudo o foco na transferência unidimensional turbulenta de massa. Pode-se inferir que uma solução que envolva as equações (52) e (53) é complexa. Devido ao método OQA definir quatro funções básicas torna-se necessário a utilização de quatro equações para fechar o equacionamento (a equação (52) e a equação (53) para três diferentes θ). Essa é uma das vantagens do método, ou seja, há um número finito de

incógnitas, ao invés das infinitas incógnitas vinculadas ao problema de fechamento. Schulz et al (2011a, 2011b), com o intuito de simplificar esta questão, consideraram uma função coeficiente de redução com valor constante ao longo do eixo vertical z . Os autores frisaram que esta era uma simplificação, uma vez que as medidas experimentais apresentadas em Schulz e Janzen (2009) já mostraram que esta função varia de acordo com as expectativas conceituais. Posteriormente, os autores agruparam as funções básicas β e $\sqrt{w'^2}$, que aparecem sempre agrupadas nas equações (52) e (53), na forma:

$$IJ = \frac{n(1-n)(1-\alpha)\sqrt{w'^2}}{\sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(2\beta-1)^2}}} \quad (54)$$

Tornou-se possível, portanto, que o equacionamento fosse reduzido para duas equações somente, uma equação para n e outra para IJ . A equação (53) foi considerada com $\theta=2$. Com estas considerações o sistema de equações fica assim definido:

$$\left. \begin{aligned} K(1-n) &= D \frac{d^2 n}{dz^2} - \frac{d(IJ)}{dz} \\ -Kn(1-n)A^2 + (IJ) \frac{dn}{dz} + \frac{A}{2} \frac{d}{dz} [(IJ)(1-2n)] &= -2Dn(1-n)A^2 \frac{d^2 n}{dz^2} \end{aligned} \right\} \quad (55)$$

No sistema de equações (55) é definido que $A=(1-\alpha)$. O sistema de equações (55) pode ser apresentado de forma adimensional, considerando $z^*=z/E$, com $E=z_2-z_1$, e $k=KE^2/D$:

$$IJ^* = \frac{n(1-n)A\sqrt{w'^2}}{KE \sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(2\beta-1)^2}}} \quad (56)$$

$$\left. \begin{aligned} 1-n &= \frac{1}{k} \frac{d^2 n}{dz^{*2}} - \frac{d(IJ^*)}{dz^*} \\ -n(1-n)A^2 + (IJ^*) \frac{dn}{dz^*} + \frac{A}{2} \frac{d}{dz^*} [(IJ^*)(1-2n)] &= -\frac{2}{k} n(1-n)A^2 \frac{d^2 n}{dz^{*2}} \end{aligned} \right\} \quad (57)$$

A obtenção de uma única equação para a função n é realizada através de simples substituição por meio do termo dIJ^*/dz^* presente no sistema de equações (57). Pelo fato deste termo estar

presente também em sua forma integrada, a equação final para n apresenta uma ordem a mais para a derivada espacial de n . A equação para n é apresentada pela equação (58), sua obtenção pode ser encontrada em detalhes em Schulz et al (2011a).

$$\begin{aligned}
& A \left[2An(1-n) + \frac{(1-2n)}{2} \right] \frac{d^3n}{dz^{*3}} \frac{dn}{dz^*} \\
& + A \left\{ - \left[2An(1-n) + \frac{(1-2n)}{2} \right] \frac{d^2n}{dz^{*2}} + k(1-n) \left[\frac{2n(A-1)+1}{2} \right] \right. \\
& + \frac{\{1+2A[A(1-2n)-1]\}}{A} \left(\frac{dn}{dz^*} \right)^2 \left. \right\} \frac{d^2n}{dz^{*2}} \\
& + k \left\{ (A-1)(1-n) - A \left[A(1-2n) - \left(\frac{3}{2} - 2n \right) \right] \right\} \left(\frac{dn}{dz^*} \right)^2 = 0
\end{aligned} \tag{58}$$

Observa-se que, para o caso idealizado, uma única equação é utilizada para a obtenção do perfil normalizado de concentração n e depende de apenas dois parâmetros adimensionais, A e k . O parâmetro A é um parâmetro constante que representa a redução das flutuações de concentração devido a efeitos difusivos e, por sua vez, k é um adimensional que envolve o coeficiente de transferência de massa e variáveis físicas do fenômeno.

Schulz et al (2011b), utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem para a solução numérica da equação (58), apresentaram uma primeira avaliação para o perfil de n . Estas predições foram comparadas com os dados experimentais de Janzen (2006) e obteve-se boa concordância entre os mesmos. Para o caso extremo de $A=0$ a equação (58) admite solução analítica na forma:

$$\frac{d^2n}{dz^{*2}} = k(1-n) \quad \text{ou} \quad n = 1 - \frac{\text{sen}(\sqrt{k}z^*)}{\text{sen}(\sqrt{k})} \tag{59}$$

Porém, Schulz et al (2011a) destacam que para a equação (59) os efeitos de difusão ao longo de $0 < z^* < 1$ é considerado superestimado.

As hipóteses consideradas na obtenção da equação (58) geraram as seguintes condições:

- O perfil da concentração é contínuo e suave;
- O perfil da derivada primeira da concentração é contínuo e não suave;
- O perfil da derivada segunda da concentração é contínuo e não suave;
- O perfil da derivada terceira da concentração é descontínuo.

Com o objetivo de avaliar estas condições e a abrangência do modelo idealizado, o estudo proposto nesta pesquisa é centrado em uma análise matemático-numérica da equação (58). Para a simulação do comportamento do perfil de n foi utilizado, igualmente, o método de Runge-Kutta de quarta ordem, devido à sua ampla utilização no meio acadêmico, e também, por possuir baixo erro e custo computacional em comparação a outros métodos numéricos. A simulação foi conduzida impondo convenientes valores para o parâmetro k , segundo dados experimentais de Janzen (2006). Uma condição de contorno com base física, proposta nesta pesquisa, é adicionada ao conjunto de condições de contorno comumente utilizadas na transferência interfacial de massa. Esta nova condição consiste um avanço na análise da integração numérica da equação (58).

Encerrado, acredita o autor, os tópicos relevantes da revisão bibliográfica que objetivavam uma melhor compreensão acerca do assunto em análise nesta dissertação, apresenta-se no capítulo 3 a proposta metodológica deste estudo.

3 PROPOSTA

Neste capítulo são apresentadas as propostas para duas novas condições de contorno a serem testadas na integração numérica da equação (58), bem como a sugestão de teste e de trabalho com uma equação similar para a obtenção do perfil n , porém de segunda ordem. Na sequência, a extensão do transporte escalar do caso de massa para o caso de calor é apresentada, seguida das diretrizes gerais utilizadas no desenvolvimento deste trabalho.

3.1 Novas Condições de Contorno Adicionadas às Condições de Contorno Usuais para o Transporte Interfacial de Massa

3.1.1 Condição de Contorno em $z^*=1$

Conforme já foi mencionado, diferentes modelos para a esquematização física do fenômeno de transporte interfacial de massa foram propostos por diversos pesquisadores engajados com o assunto. As dificuldades encontradas, por exemplo, na análise de parâmetros estatísticos, de melhores entendimentos acerca das bases físicas do fenômeno, de solução das equações diferenciais não lineares de ordem superior, somado às dificuldades também encontradas no equacionamento da turbulência, motivam as pesquisas dessa área. Procurou-se apresentar, na seção anterior, a aplicação do método OQA para um caso de transporte unidimensional interfacial turbulento de massa cuja solução fica condicionada às equações apresentadas e às condições de contorno utilizadas para essa situação de transporte. O esquema da Figura 9 ilustra a situação física considerada para a transferência unidimensional interfacial assumindo que haja homogeneidade horizontal da concentração média e ilustra, também, as condições de contorno usualmente empregadas nessa situação.

Figura 9: Condições de contorno e esquema físico para o problema de transferência de massa através da interface ar-água

Observa-se que a definição prática de camada limite de concentração não foi considerada no esquema físico. As condições de contorno usualmente empregadas para o problema de transporte em estudo são:

- $n=1$, em $z^*=0$;
- $n=0$, em $z^*=1$;
- $dn/dz^*=0$, em $z^*=1$.

Nos desenvolvimentos específicos do presente estudo, foi possível mostrar que, com estas condições de contorno torna-se possível a obtenção de um novo contorno quando da aplicação da equação (58) em $z^*=1$, conforme se segue:

$$\left(k - \frac{d^2 n}{dz^{*2}} \right) \frac{d^2 n}{dz^{*2}} \bigg|_1 = 0 \quad (60)$$

Pela equação (60) pode se observar que a segunda derivada do perfil normalizado de concentração, ao final da região de transferência, é matematicamente definida como sendo $n''(1) = 0$ ou $n''(1) = k$. Inicialmente apenas a segunda condição havia sido considerada, mas as discussões em torno do tema, no contexto da pesquisa, elucidaram a presença também da primeira condição. A avaliação destas duas possibilidades é aqui analisada frente ao desenvolvimento da integração numérica.

3.1.2 Condição de Contorno em $z^*=0$

Quanto à aplicação da equação (58) em $z^*=0$, não é possível a obtenção de um contorno elementar adicional. O contorno, na sua forma completa, seria descrito por:

$$\begin{aligned} -\frac{A}{2} \frac{d^3 n}{dz^{*3}} \Big|_0 \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 + \frac{A}{2} \left(\frac{d^2 n}{dz^{*2}} \Big|_0 \right)^2 + \{1 - 2A^2 - 2A\} \left(\frac{dn}{dz^*} \Big|_0 \right)^2 \frac{d^2 n}{dz^{*2}} \Big|_0 \\ + k \left\{ A^2 - \frac{A}{2} \right\} \left(\frac{dn}{dz^*} \Big|_0 \right)^2 = 0 \end{aligned} \quad (61)$$

Contudo, em discussões em torno do tema, no contexto da pesquisa, em nível de informação pessoal, Schulz² comentou que os procedimentos experimentais informados na bibliografia envolvem uma operação de extrapolação linear de valores de concentração próximos à interface para a própria interface. Schulz² comentou que, nesse caso, em sendo válido esse procedimento experimental, segue-se que a derivada segunda desta extrapolação linear é nula na superfície e a equação (61) passa a ser convertida simplesmente a:

$$\frac{d^3 n}{dz^{*3}} \Big|_0 = k(2A - 1) \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 \quad \text{ou} \quad \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = 0 \quad (61a)$$

A derivada primeira nula não é uma solução viável. Resta, portanto, a equação que envolve as derivadas primeira e terceira. Trata-se de um contorno elementar, condicionado à validade da operação prática. Em suma, haveria uma relação fixa entre a derivada terceira e a derivada primeira, dada por:

$$\frac{d^3 n}{dz^{*3}} \Big/ \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = k(2A - 1) \quad (61b)$$

Apenas a guisa de exemplo, para $A=1/2$ tem-se o valor zero para o segundo membro. Fisicamente são aguardados valores negativos para a primeira derivada em $z^*=0$ nos perfis normalizados de concentração válidos. Portanto, pelas equações (61a) e (61b), se observa que

² Informação fornecida por Schulz em São Carlos, 2012.

o valor de A definirá o sinal da terceira derivada em $z^*=0$. No caso em que $A < 1/2$, a terceira derivada apresenta-se positiva e, para $A > 1/2$, tem-se uma terceira derivada negativa. Trata-se, portanto, de um contorno de fácil manipulação, podendo ser utilizado para testar o perfil mais adequado à condição experimental ensaiada, restringindo talvez a gama de resultados viáveis possíveis. Vale enfatizar novamente que tal contorno usa um procedimento experimental como justificativa. Na sequência das discussões em torno do tema considerou-se a aproximação empírica do perfil exponencial de concentrações, que, por sua vez, não admite a nulidade da segunda derivada. Assim, as equações (61a) e (61b) necessitam de comprovação através de simulações numéricas e comparações com dados experimentais.

Como observação adicional a este contorno de superfície, Schulz³ comentou que as extrapolações experimentais mencionadas são feitas porque as medidas experimentais não são precisas quando muito próximas à interface, sugerindo inflexões que não foram ainda consideradas como fisicamente justificadas (e, portanto suprimidas com a extrapolação mencionada).

Contudo, em se justificando essas inflexões, a nulidade da segunda derivada passa a ser válida para outra posição $z^* \neq 0$. Assim, o contorno, em sua forma completa, seria descrito por:

$$A \left[2An_{z^*_i}(1 - n_{z^*_i}) + \frac{(1 - 2n_{z^*_i})}{2} \right] \frac{d^3n}{dz^{*3}} \Big|_{z^*_i} \frac{dn}{dz^*} \Big|_{z^*_i} + k \left\{ (A - 1)(1 - n_{z^*_i}) - A \left[A(1 - 2n_{z^*_i}) - \left(\frac{3}{2} - 2n_{z^*_i} \right) \right] \right\} \left(\frac{dn}{dz^*} \Big|_{z^*_i} \right)^2 = 0 \quad (62)$$

Onde $n_{z^*_i}$ é o valor de n na posição em que houve a inflexão.

Finalmente, como observação final, Schulz³ comentou que em se tendo todos os valores da função n e de suas derivadas em $z^*=0$, a equação (61) deve ser naturalmente satisfeita. As equações (61a) e (61b) são aquelas que surgem com “novas” informações.

³ Informação fornecida por Schulz em São Carlos, 2012.

3.1.3 Conjunto das Condições de Contorno para o Problema

Com base nas considerações anteriores, tem-se, portanto, o esquema ilustrado pela Figura 10a que demonstra as condições de contorno conhecidas para o problema de transferência em questão, adicionada da condição em $z^*=1$ dada pela equação (60). A Figura 10b mostra a adição das condições de contorno decorrentes dos procedimentos experimentais que ainda devem ser testados.

Figura 10: a) Condições de contorno conhecidas e da equação (60), b) Condições de contorno conhecidas e estimadas, para o problema de transferência unidimensional interfacial de massa segundo utilização do método das OQAs e a aproximação linear do perfil junto à superfície

Pode-se, portanto, reduzir a solução numérica da equação (58) a um problema de valor inicial, sendo sua integração realizada partindo-se do seio fluido em direção à superfície. A proposta de simulação numérica segue semelhante àquelas utilizadas por Schulz et al (2011a, 2011b), Lopes Júnior (2012) e Lopes Júnior e Schulz (2012), nas quais se adota um sistema de equações derivado da equação (58), como segue:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn}{dz^*} = j, \frac{dj}{dz^*} = w, \frac{dw}{dz^*} = \frac{f_1 + f_2}{f_3} \quad \text{onde} \\ f_1 = -A \left\{ - \left[2An(1-n) + \frac{(1-2n)}{2} \right] w + k(1-n) \left[\frac{2n(A-1) + 1}{2} \right] \right. \\ \quad \left. + \frac{\{1 + 2A[A(1-2n) - 1]\}}{A} j^2 \right\} w, \\ f_2 = -k \left\{ (A-1)(1-n) - A \left[A(1-2n) - \left(\frac{3}{2} - 2n \right) \right] \right\} j^2, \\ f_3 = A \left[2An(1-n) + \frac{(1-2n)}{2} \right] j. \end{array} \right. \quad (63)$$

Nos trabalhos anteriormente referidos, os autores consideravam $j(0) \approx -3$ de acordo com os dados experimentais de Janzen (2006). Objetivando solucionar o sistema como um problema de valor inicial, cuja integração numérica iniciava na superfície, havia o problema, como se pode compreender pela Figura 10a, de se controlar os ajustes dos valores não só da primeira, mas, também da segunda e terceira derivada em $z^*=0$. Diferentes estruturas de condições de contorno foram testadas e analisadas por Lopes Júnior (2012) e Lopes Júnior e Schulz (2012), que apresentaram soluções de perfis para n aparentemente viáveis. Contudo não foi empregado algum critério que restringisse as múltiplas possibilidades para valores de A , k e as derivadas de n . Com a nova informação do valor da segunda derivada de n em $z^*=1$ superaram-se estas dificuldades iniciais. Não obstante, eventualmente muitos perfis podem ainda representar soluções viáveis para a díade (A, k) , uma vez que, em princípio, diferentes valores da terceira derivada em $z^*=1$ podem conduzir a perfis possíveis. Esta questão apenas pode ser respondida através de experimentos numéricos. Nesse caso, segundo Schulz⁴, o contorno adicional em $z^*=0$ pode representar uma forma de limitar esse número de possibilidades (eventualmente fornecendo uma única solução).

Também no contexto dessa linha de pesquisa, verificou-se, como já mencionado, que o caso idealizado (representado pela equação (58)) gerou um perfil descontínuo para a derivada terceira de n . Isto ocorre devido à função f_3 que aparece no denominador em $dw/dz^* = (f_1 + f_2)/f_3$ (sistema de equações (63)), que se anula quando:

$$n = \frac{2A - 1 + \sqrt{4A^2 + 1}}{4A} \quad (64)$$

⁴ Informação fornecida por Schulz em São Carlos, 2012.

Devido aos valores de A variarem entre 0 e 1, f_3 se anula para valores de n entre 0,5 e aproximadamente 0,809. Este ponto de singularidade presente no domínio do cálculo, bem como suas consequências, quanto à abrangência do modelo idealizado, necessitam ser melhor averiguados, o que foi um ponto de investigação do presente estudo, que mostra as conclusões mais relevantes já atingidas, principalmente vinculadas ao próprio estudo. Nesse sentido, extensões de informações feitas por Kasnodzei et al (2013) e Souza et al (2013), relativas a condição de real continuidade da derivada terceira neste ponto de singularidade, são também aqui efetuadas. Os referidos autores também atuam na presente linha de pesquisa. As extensões aqui feitas avançam para o entendimento da razão da continuidade observada.

3.2 Uso de uma Equação de Segunda Ordem (Equação Integrada) na Representação do Perfil de Concentrações

No capítulo 6 apresentam-se os detalhes de uma formulação obtida das mesmas considerações seguidas no capítulo 2, porém que conduz a uma equação diferencial não-linear de segunda ordem. As suas características gerais são as mesmas da equação de terceira ordem já discutida, desenvolvida para a mesma situação física, obtendo-se o mesmo ponto de descontinuidade. A equação, fornecida como informação pessoal por Schulz⁵, é:

$$\begin{aligned} -A(1-n) \left[An + \frac{(1-2n)}{2} \right] + \left[\frac{1}{k} \frac{dn}{dz^*} - z^* + \int ndz^* + C \right] (1-A) \frac{dn}{dz^*} \\ = -\frac{A}{2k} [4An(1-n) + (1-2n)] \frac{d^2n}{dz^{*2}} \end{aligned} \quad (65)$$

A equação (65) é bem mais simples que a equação original, sendo usada aqui como teste e como comprovação das previsões efetuadas com a equação (58). As variáveis têm o mesmo significado da equação original, apenas entrando o fator de calibração C , que é uma constante de integração. Em se verificando a sua validade, será indicada para utilização nos estudos posteriores dos perfis turbulentos.

⁵ Informação fornecida por Schulz em São Carlos, 2013.

O estudo de comparação foi feito gerando diferentes condições que satisfazem contornos escolhidos entre aqueles determinados na Figura 10a. Um “catálogo de perfis” foi gerado, contendo valores de variáveis para uma análise de perfis específicos *a posteriori*.

No caso de assumir o perfil prático linear junto à superfície, que levou à equação (61b), tem-se:

$$\frac{1}{k} \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 + \int ndz^* + C = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = 0 \quad (65a)$$

Ou seja, novamente tem-se uma condição inviável (derivada primeira nula) e uma condição a explorar, que simplesmente fornece uma relação constante para a derivada primeira, uma vez que a constante de integração C tem valor desconhecido. A integral (indicada a seguir por I) tem valor nulo ou um valor diferente de zero, dependendo da orientação da integração. Da forma mais simples tem-se:

$$\frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = -k(I + C) \quad \text{ou} \quad \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = -kC \quad (65b)$$

A união das equações (61b) e (65b) com $I=0$ conduz imediatamente a:

$$\frac{d^3n}{dz^{*3}} \Big|_0 = -k^2C(2A - 1) \quad (65c)$$

A Figura 10c mostra os contornos estimados utilizando a equação de segunda ordem e simplificação linear junto à superfície. Frisa-se que qualquer conclusão só pode ser obtida a partir de experimentos numéricos.

Figura 10: c) Condições de contorno conhecidas e estimadas com a aproximação linear do perfil junto à superfície, considerando $I=0$

3.3 Transporte de Calor

Tendo detalhado os aspectos relativos à formulação unidimensional de transferência de massa para a função de redução constante, no qual tanto propostas deste próprio estudo, como propostas fornecidas em nível de informação pessoal por pesquisadores envolvidos nesta linha de pesquisa foram averiguadas, uma extensão para o caso de transferência de calor foi efetuada.

Nesse caso, toda a formulação foi desenvolvida no contexto do presente estudo, considerando um caso de invariabilidade do perfil médio de temperatura. Ou seja, buscou-se uma situação de estudo em que a turbulência estacionária também se aplica ao perfil escalar. Entende-se que esta abordagem complementa as observações anteriores relativas à estacionariedade dos campos vetoriais (de velocidade) e escalares (de concentração ou temperatura). As equações para as derivadas segunda e terceira foram construídas, havendo interessantes conclusões referentes aos termos nelas presentes. A equação (66) é aquela que substitui a equação (65), para o caso da derivada segunda.

$$A_T \left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right] \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} + (1 - A_T) \left(\frac{\partial n_T}{\partial z^*} + \text{Pr} C_T \right) \frac{\partial n_T}{\partial z^*} = 0 \quad (66)$$

Nesta equação Pr é o número de Prandtl, que multiplica o fator de calibração C_T . n_T é o perfil normalizado de temperaturas e A_T é a função de redução (também admitida constante). Os

desenvolvimentos e as conclusões acerca do perfil de temperaturas são apresentados no capítulo 7.

3.4 Material e Métodos

O trabalho desenvolvido é essencialmente conceitual/teórico e numérico. A metodologia, assim sendo, envolveu o aprofundamento conceitual nas ferramentas matemáticas que tratam de equações diferenciais não lineares e de funções que admitem derivadas parciais em pontos de não continuidade, como referido por Guidorizzi (2001). Foi necessário o emprego das ferramentas do cálculo numérico para a resolução das equações (58), (65) e (66), uma vez que tratam-se de equações não lineares com comportamentos não elementares.

De modo geral, a metodologia utilizada envolveu sete etapas principais:

- (i) Desenvolvimento Teórico: buscou-se a compreensão através da revisão da literatura dos assuntos correlatos ao tema proposto. Propôs-se a determinação do contorno da derivada segunda na posição $z^*=1$.
- (ii) Desenvolvimento Numérico: realizou-se a adequação da equação (58) para a forma discreta no método numérico de Runge-Kutta de quarta ordem otimizando os parâmetros envolvidos com o uso do método de quasi-Newton.
- (iii) Resolução Numérica: obteve-se a integração numérica da equação discretizada avaliando seus comportamentos segundo variação de parâmetros do modelo OQA e de parâmetros intrínsecos ao próprio método numérico.
- (iv) Os passos (ii) e (iii) foram repetidos para a equação (65).
- (v) Os passos (ii) e (iii) foram repetidos para a equação (66).
- (vi) O contorno da razão entre derivada na posição $z^*=0$, equação (61a) (ou 61b) foi testado no contexto das soluções já obtidas.
- (vii) Discussão dos Resultados: avaliaram-se os resultados obtidos com o intuito de ajuizar discussões e gerar, conseqüentemente, conclusões acerca da pesquisa empreendida.

O estudo foi conduzido utilizando:

- Microcomputador (compatível para simulação numérica);

- Software de planilha de cálculo - Microsoft Excel[®];
- Programação computacional em linguagem compilada C++.

4 AVALIAÇÃO DO PONTO SINGULAR

Neste capítulo é apresentado o estudo desenvolvido para a avaliação do ponto singular presente no perfil da terceira derivada espacial do perfil normalizado de concentração, bem como os resultados e discussões decorrentes da solução numérica da equação (58). A metodologia utilizada para a solução numérica da equação (58) é, também, apresentada.

4.1 Solução Numérica da Equação (58)

A solução numérica objetivou obter uma simulação para o modelo idealizado, que permitisse avaliar o seu comportamento e inferir características e/ou limitações, atendendo assim ao objetivo geral desta pesquisa. A solução numérica da equação (58) foi obtida através do método de Runge-Kutta de quarta ordem. Seguiu-se de modo semelhante o esquema de solução (no caso o sistema de equações (63)) apresentado por Schulz e Janzen (2009) e Schulz et al (2011a, 2011b).

Salienta-se mais uma vez que o modelo estatístico baseado no método OQA está sendo considerado de modo simplificado, por definir constante a função de redução α . Um caso com α constante é fisicamente improvável, mas justifica-se seu uso como valor médio na avaliação do comportamento geral da equação.

Uma avaliação do perfil de α foi realizada de modo experimental por Schulz e Janzen (2009), mostrando uma significativa dependência dos perfis de α com as condições de agitação do meio. A Figura 11 ilustra esta dependência.

Na Figura 11, $z^+ = z/p_c$ e p_c [m] é a posição do pico da função RMS da flutuação de concentração. Observa-se que a difusividade molecular é dominante para $z^+ < 1$, ou seja, próximo à superfície. Para $z^+ > 1$ há a superposição dos efeitos da difusividade molecular e turbulenta que homogeneízam a concentração de gás dissolvido no seio líquido.

Figura 11: Perfis de α e respectiva dependência com a agitação do meio. Schulz e Janzen (2009)

Um requisito desejável para a previsibilidade de uma função é a sua continuidade. Funções não contínuas podem causar dificuldade na tentativa de aproximar uma solução ao problema. Uma função com gráfico suave baseado no conceito da derivada comporta-se de modo mais previsível do que aquela com características irregulares (BURDEN E FAIRES, 2008). Como já referido, a equação (58) apresenta um ponto de descontinuidade no domínio de cálculo, para a terceira derivada espacial, devido à parcela f_3 presente no cálculo dessa terceira derivada, $dw/dz^* = (f_1 + f_2)/f_3$. Torna-se, portanto, necessário avaliar a implicação dessa singularidade nas demais derivadas espaciais de ordem menor e no próprio perfil normalizado de concentração, inclusive para validação das previsões dos perfis obtidos através do modelo OQA idealizado.

A utilização do método de Runge-Kutta, como já citado na subseção 2.8.3, foi considerada devido à sua ampla utilização no meio acadêmico, e também, devido o seu baixo erro e custo computacional em comparação a outros métodos numéricos.

4.1.1 Método de Runge-Kutta de Quarta Ordem

O método de Runge-Kutta é adequado para a simulação de problemas de valor inicial de equações diferenciais ordinárias. Esse método possui a propriedade desejável de *erro de*

truncamento local de alta ordem baseado na *série de Taylor* e, ao mesmo tempo, elimina a necessidade de se calcular as derivadas parciais exigidas pelos métodos numéricos de Taylor, por exemplo (BURDEN E FAIRES, 2008).

Conceitualmente o embasamento matemático do método parte de uma relação linear entre uma função y qualquer e uma variável x , de modo que $y = g(x)$. Essa relação pode ser representada da seguinte forma:

$$y_{i+1} = y_i + \psi h \quad (67)$$

Na equação (67), i é a iteração atual, h representa a variação da variável x , e ψ é uma função que representa a taxa de variação de y em relação a h . A função ψ é expressa de diversas formas por estudiosos da área e exprimi-la explicitamente exige um algebrismo longo que não é objeto do presente trabalho. Dessa forma, foi utilizada a equação amplamente difundida para o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

A ordem do método de Runge-Kutta expressa o expoente do erro global do método. O método de quarta ordem requer o cálculo de quatro parcelas da função discretizada por passo. Esta ordem é a de uso mais comum e a equação de diferença é apresentada da seguinte forma (ver, por exemplo, Burden e Faires, 2008):

$$\left. \begin{aligned} k_1 &= hf(x_i, y_i) \\ k_2 &= hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= hf(x_{i+1}, y_i + k_3) \\ y_{i+1} &= y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned} \right\} \quad (68)$$

O principal esforço computacional é o cálculo de f .

Conforme o sistema de equações (63), os valores da terceira derivada espacial foram computados a partir da própria equação (58). A segunda derivada espacial foi computada em relação à terceira derivada espacial através do método de Runge-Kutta e, de maneira análoga e sequencial, realizaram-se os cálculos para a primeira derivada espacial e para o perfil normalizado de concentração. Porém, como mencionado, para cada parcela de cálculo torna-se necessário determinar os k s do sistema de equações (68). Para tanto, os valores das funções

nestes pontos auxiliares secundários foram obtidos utilizando de um algoritmo simples do método de quasi-Newton. Esse algoritmo é baseado na derivada primeira da função em análise na iteração, ou seja, necessita-se apenas que o gradiente da função esteja disponível em cada iteração. Os métodos quasi-Newton são derivados do método da Secante, utilizando a seguinte aproximação:

$$f'(x_1) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad (69)$$

4.1.2 Simulação Numérica

A simulação numérica foi realizada primeiramente iniciando o processo iterativo no seio líquido, em $z^*=1$, utilizando as condições de contorno conforme apresentadas nas figuras 10a, b e c, e terminando-o na superfície líquida, em $z^*=0$. Objetivando uma melhor compreensão do esquema da solução numérica empregada, são expostos a seguir os passos utilizados na mesma.

A Figura 12 ilustra os pontos auxiliares secundários do perfil normalizado de concentração, n .

Figura 12: Pontos auxiliares secundários de n

O cálculo dos valores dos pontos auxiliares secundários e do próximo valor de n na posição $i-1$, sendo conhecido o valor de n na posição i , foi realizado pelo método de quasi-Newton considerando os valores da primeira derivada, j . A indicação das letras a e b nos pontos secundários visa facilitar o entendimento da solução numérica, não gerando ambiguidades nesses pontos intermediários.

Os cálculos ficam assim definidos:

- $n_{i-1/2}^a = n_i - (\Delta z^*/2) j_i$
- $n_{i-1/2}^b = n_i - (\Delta z^*/2) j_{i-1/2}^a$

- $n_{i-1} = n_i - \Delta z^* j_{i-1/2}^b$

Observe que se torna necessário o conhecimento dos valores dos pontos auxiliares secundários da primeira derivada j que, por conseguinte, necessita para o seu cálculo do conhecimento dos valores dos pontos auxiliares secundários da segunda derivada w que dependem por sua vez dos auxiliares da terceira derivada dw/dz^* . O esquema de solução, portanto, é concatenado na ordem aqui explicitada.

Os valores dos pontos principais e auxiliares da primeira derivada constituem-se nos valores dos parâmetros k s a serem utilizados para o cálculo do valor definitivo de n_{i-1} através do método de Runge-Kutta. O mesmo ocorre para as primeira e segunda derivadas. A terceira derivada, como já referido, é calculada diretamente pela equação (58).

Uma vez obtidos os valores sequenciais da função e de suas derivadas, os valores auxiliares anteriores são desconsiderados e novos valores são calculados pelo método de quasi-Newton na sequência que fornece os valores definitivos da função e das derivadas através do método de Runge-Kutta. Assim, pode-se dizer que há um cálculo “horizontal” de passos auxiliares e um cálculo “vertical” dos pontos definitivos.

O cálculo definitivo de n_{i-1} , através do método de Runge-Kutta, a partir de n_i , com a utilização dos pontos auxiliares concatenados das respectivas derivadas obtidos por quasi-Newton é resumido nas equações (70) e (70a) até (70e).

$$n_{i-1} = n_i - \frac{\Delta z^*}{6} [k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4] \quad (70)$$

$$n_{i-1} = n_i - \frac{\Delta z^*}{6} \left[j_i + 2 \left(j_{i-\frac{1}{2}}^a + j_{i-\frac{1}{2}}^b \right) + j_{i-1} \right] \quad (70a)$$

$$n_{i-1} = n_i - \frac{\Delta z^*}{6} \left[j_i + 2 \left(j_i - \frac{\Delta z^*}{2} w_i + j_i - \frac{\Delta z^*}{2} w_{i-\frac{1}{2}}^a \right) + j_i - \Delta z^* w_{i-\frac{1}{2}}^b \right] \quad (70b)$$

$$n_{i-1} = n_i - \Delta z^* j_i + \frac{\Delta z^{*2}}{6} w_i + \frac{\Delta z^{*2}}{6} w_{i-\frac{1}{2}}^a + \frac{\Delta z^{*2}}{6} w_{i-\frac{1}{2}}^b \quad (70c)$$

$$n_{i-1} = n_i - \Delta z^* j_i + \frac{\Delta z^{*2}}{6} w_i + \frac{\Delta z^{*2}}{6} \left(w_i - \frac{\Delta z^*}{2} \frac{dw}{dz^*}_i \right) + \frac{\Delta z^{*2}}{6} \left(w_i - \frac{\Delta z^*}{2} \frac{dw^a}{dz^*}_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (70d)$$

$$n_{i-1} = n_i - \Delta z^* j_i + \frac{\Delta z^{*2}}{2} w_i - \frac{\Delta z^{*3}}{12} \frac{dw}{dz^*}_i - \frac{\Delta z^{*3}}{12} \frac{dw^a}{dz^*}_{i-\frac{1}{2}} \quad (70e)$$

Apresenta-se ainda, ilustrativamente, o cálculo do ponto secundário auxiliar da derivada terceira através de uma quarta derivada.

$$n_{i-1} = n_i - \Delta z^* j_i + \frac{\Delta z^{*2}}{2} w_i - \frac{\Delta z^{*3}}{12} \frac{dw}{dz^*}_i - \frac{\Delta z^{*3}}{12} \left(\frac{dw}{dz^*}_i - \frac{\Delta z^*}{2} \frac{d^2 w}{dz^{*2}}_i \right) \quad (71)$$

$$n_{i-1} = n_i - \Delta z^* j_i + \frac{\Delta z^{*2}}{2} w_i - \frac{\Delta z^{*3}}{6} \frac{dw}{dz^*}_i + \frac{\Delta z^{*4}}{24} \frac{d^2 w}{dz^{*2}}_i = \sum_{\varepsilon=0}^4 \frac{n_i^{(\varepsilon)} \Delta z^{*\varepsilon}}{\varepsilon!} (-1)^\varepsilon \quad (71a)$$

Observa-se que a equação (71a) representa uma *série de Taylor* com cinco termos iniciais, sendo apropriada a utilização do método de quasi-Newton no cálculo dos ks do método de Runge-Kutta de quarta ordem, por ser exatamente baseado numa série de Taylor de quarta ordem. A alternância entre o sinal positivo e negativo na série se deve ao fato da integração numérica ser representada de forma retroativa sem se considerar explicitamente um valor negativo para Δz^* .

Este esquema de solução proposto para a equação (58) permite uma aplicação sistemática em qualquer planilha de cálculo. No presente estudo o esquema foi implementado inicialmente na planilha Microsoft Excel[®].

4.1.3 Aplicando o Modelo

A integração numérica considera todas as condições de contorno que são conhecidas em $z^*=0$ e $z^*=1$, ou seja, a definição prática de camada limite de concentração não é utilizada, uma vez que nenhuma informação acerca de quantificação das derivadas, por exemplo, são fornecidas nesta definição. Quando da comparação das predições obtidas, frente aos dados experimentais da literatura, a definição prática da camada limite de concentração é considerada.

A segunda derivada espacial em $z^*=1$, $w(1)$, foi obtida como sendo $w(1)=0$ ou $w(1)=k$. O valor positivo $w(1)=k$ assegura um *ponto de mínimo global* para o perfil de concentração n em $z^*=1$ ($n(1)=0$, $j(1)=0$ e $w(1)=k$), o que é fisicamente esperado. Portanto, o valor positivo para a segunda derivada foi considerado preliminarmente nas simulações numéricas e aparentemente forneceu soluções viáveis. Adianta-se que a utilização do valor nulo para a segunda derivada nas simulações numéricas não obteve resultados viáveis, sendo este comportamento analisado no capítulo 5 deste trabalho.

Os valores de referência utilizados para o parâmetro adimensional k são baseados naqueles obtidos experimentalmente por Janzen (2006), a saber, $0,003 \leq k \leq 0,004$. Assim, considerou-se nesse estudo $0,001 \leq k \leq 0,005$ com $\Delta k = 1 \times 10^{-4}$ nos primeiros testes de integrações numéricas realizados. Quanto ao parâmetro adimensional A , considerou-se $0 < A \leq 1$, com $\Delta A = 1 \times 10^{-2}$ e, posteriormente, com $\Delta A = 1 \times 10^{-3}$, com o objetivo de analisar possíveis alterações no comportamento da integração numérica dado a considerável mudança de comportamento da equação (58) quando se alteram os parâmetros de entrada. Note-se que outros valores de incrementos para Δk e ΔA foram utilizados para objetivos específicos, o que é descrito ao longo do texto.

Pela equação (58) se observa que não é possível a obtenção de uma estimativa inicial de valor para a derivada terceira espacial em $z^*=1$ devido à sua multiplicação com a primeira derivada que possui valor nulo. Isto aparece na figura 10c, onde este contorno surge como o único não avaliado. Portanto, procurando obter $n(0)=1$, com uma margem de erro de 0,1% para mais ou para menos, o valor de $dw/dz^*(1)$ (necessário para a inicialização dos cálculos) foi obtido através de “tentativa e erro” na simulação numérica. Os valores dos parâmetros A e k foram impostos e mantidos constantes em cada teste de integração numérica realizado.

Gonçalves e Schulz (2013) reproduzem a equação (72), obtida a partir da equação (58) utilizando a equação (64), que é uma condição de contorno interna na posição do ponto de descontinuidade da terceira derivada, z_d^* :

$$A \left\{ k(1 - n_d) \left[\frac{2n_d(A - 1) + 1}{2} \right] + \frac{\{1 + 2A[A(1 - 2n_d) - 1]\}}{A} \left(\frac{d^2 n}{dz^{*2}_d} \right)^2 \right\} \frac{d^2 n}{dz^{*2}_d} + k \left\{ (A - 1)(1 - n_d) - A \left[A(1 - 2n_d) - \left(\frac{3}{2} - 2n_d \right) \right] \right\} \left(\frac{dn}{dz^*_d} \right)^2 = 0 \quad (72)$$

n_d é o valor de n que satisfaz a equação (64). Contudo, a condição da equação (72) não foi empregada no estudo de Gonçalves e Schulz (2013), nem na presente simulação. Com o intuito de verificar soluções possíveis para n , a integração numérica “atravessou” o ponto de singularidade (ponto de descontinuidade da terceira derivada espacial) durante os cálculos. Obtiveram-se soluções para funções n suaves e contínuas utilizando valores distintos de parâmetros, tornando-se necessário verificar os aspectos internos da formulação que possibilitaram a obtenção destas soluções. Esta verificação ocorreu através da análise de comportamento da função n e de suas derivadas no entorno do ponto de descontinuidade,

constatando a possibilidade da integração, ou seja, se as derivadas de segunda e terceira ordem poderiam expressar um caso de *integral imprópria convergente*.

As “tabelas resumo” para aplicação do método Runge-Kutta utilizadas com o programa Microsoft Excel[®] são apresentadas no Apêndice B.

4.2 Testes, Resultados e Análise da Singularidade

As primeiras tentativas de integração numérica da equação (58) envolviam um ajuste “grosseiro” no valor inicial de $dw/dz^*(1)$ e um ajuste “fino” nos parâmetros adimensionais A e k . Observou-se assim que era possível obter soluções aparentemente viáveis para n . No entanto, os valores dos parâmetros adimensionais ficavam sem uma padronização pré-definida. Optou-se então por considerar valores padronizados para A e k , descritos na subseção 4.1.3, e realizar ajustes somente no valor da terceira derivada em $z^*=1$ (o valor da terceira derivada foi considerado com o número de algarismos significativos mais conveniente). Este procedimento produziu soluções viáveis dentro da margem de erro $n(0)$ de $\pm 0,1\%$ para $dw/dz^*(1)$ no intervalo de $-0,08$ a $-0,01$. Esta referência de valores para $dw/dz^*(1)$ com $\Delta(dw/dz^*(1))=1 \times 10^{-4}$ foi então considerada nos trabalhos subsequentes, que constituem parte dos resultados apresentados nesta dissertação.

Sempre que a brevidade da exposição assim pedia, foi considerada a notação $j=n'$, $w=n''$ e $dw/dz^*=n'''$ na apresentação dos resultados aqui obtidos.

A Figura 13 mostra o comportamento de n , n' , n'' e n''' , para $k=0,002$, $A=0,39$ e $n'''(1)=-0,0258$, com $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$, a descontinuidade ocorre em $z^* \approx 0,076671$ com $n_d \approx 0,671940$, e $n(0) \approx 0,999872$. Resultados similares, obtidos no contexto da presente pesquisa, foram já divulgados em Gonçalves e Schulz (2013), apresentados como uma das “keynote addresses” do evento Multiphase Flow 2013.

Observa-se pela Figura 13 a continuidade e suavidade do perfil de n apesar do ponto de descontinuidade presente no perfil de n''' . No ponto de descontinuidade, n''' tende a $\pm$ infinito e, por conseguinte leva a uma verticalização de n'' nesta região. Apesar do comportamento de n'' , a primeira derivada se apresentou visualmente contínua, porém exibe um ponto de inflexão, ou seja, há um efeito de n'' no perfil de n' .

Os estudos descritos sugeriram analisar como varia um dos parâmetros de controle, como A , por exemplo, em se variando seletivamente outros parâmetros presentes na formulação. Também se efetuou uma análise da influência da resolução empregada, ou seja, o efeito do Δz^* empregado na integração numérica no comportamento das funções em estudo. Os resultados são discutidos na análise de sensibilidade do capítulo 5. A análise do comportamento de n'' frente a outras condições de teste também foi efetuada, conforme mostrado adiante no texto.

A Figura 14 mostra o comportamento de n , n' , n'' e n''' , para $k=0,0025$, $A=0,46$ e $n'''(1)=-0,0297$, com $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$, a descontinuidade ocorre em $z^* \approx 0,049681$ com $n_d \approx 0,695012$, e $n(0) \approx 0,999158$ (ver resultados similares em Gonçalves e Schulz, 2013).

Figura 13: Perfis de n , n' , n'' , n''' . $k=0,002$, $A=0,39$, $n'''(1) = -0,0258$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Figura 14: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,0025, A=0,46, n'''(1) = -0,0297$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Pela Figura 14 se observa que o comportamento foi semelhante ao apresentado pela Figura 13, com exceção ao perfil de n'' no qual há agora uma tendência a um valor grande, eventualmente uma tendência para infinito, na região da singularidade. Entretanto, como o perfil de n' não mostra uma verticalização local (visível), possivelmente o valor de n'' é finito no ponto singular para n''' .

As próximas figuras, 15, 16, 17 e 18, apresentam os comportamentos de n, n', n'' e n''' para outras condições de parâmetros de entrada, com $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$. Na Figura 15 tem-se $k=0,003, A=0,6$ e $n'''(1) = -0,0332$, a descontinuidade ocorre em $z^* \approx 0,029598$ com $n_d \approx 0,734187$, e $n(0) \approx 1,000624$. Na Figura 16, $k=0,004, A=0,32$ e $n'''(1) = -0,0526$, $z_d^* \approx 0,114952$ com $n_d \approx 0,646301$, e $n(0) \approx 1,000707$. Na Figura 17, $k=0,004, A=0,69$ e $n'''(1) = -0,0421$, $z_d^* \approx 0,021604$ com $n_d \approx 0,755156$, e $n(0) \approx 0,999208$. Na Figura 18, $k=0,0015, A=0,37$ e $n'''(1) = -0,02$, $z_d^* \approx 0,073319$ com $n_d \approx 0,664882$, e $n(0) \approx 1,000973$.

Figura 15: Perfis de n , n' , n'' , n''' . $k=0,003$, $A=0,6$, $n'''(1) = -0,0332$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Figura 16: Perfis de n , n' , n'' , n''' . $k=0,004$, $A=0,32$, $n'''(1) = -0,0526$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Figura 17: Perfis de n , n' , n'' , n''' . $k=0,004$, $A=0,69$, $n'''(1) = -0,0421$ e $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$

Figura 18: Perfis de n , n' , n'' , n''' . $k=0,0015$, $A=0,37$, $n'''(1) = -0,02$ e $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$

As figuras acima demonstram que n''' tende para mais ou menos infinito em torno do ponto singular e que n'' apresenta comportamentos diferenciados, ora parece apresentar-se descontínua e ora contínua no ponto onde sua derivada é infinita. A condição de continuidade para menores valores de A foi localizada em estudos desta linha de pesquisa por Kasnodzei et al (2013) e Souza et al (2013), que passaram a explorar o contorno interno de $f_1+f_2=0$ expresso em Gonçalves e Schulz (2013) (equação (72)) como condição de convergência para A constante. Entretanto os autores mencionados não efetuaram uma análise detalhada da supressão da descontinuidade, que foi conduzida no presente estudo. A primeira parcela da equação (58) é indeterminada na posição z_d^* devido ao produto de zero por $\pm\infty$. Como se trata de uma indeterminação, um valor finito para n'' é possível, embora não seja conhecido *a priori*. Observa-se também que n' apresenta-se contínuo e não suave, havendo um comportamento diferente de n' em se aproximando de z_d^* pela direita e pela esquerda. Torna-se necessário averiguar se de fato há uma curva contínua para n' com um possível ponto de “inflexão” (entendido aqui como a descontinuidade na declividade). A região interfacial onde se dá a transferência de massa é composta de sub-regiões sujeitas a diferentes mecanismos de transporte, como já elucidado anteriormente, e comportamentos diferentes de perfis representativos do fenômeno podem ser correlacionados com estas sub-regiões. Apesar das características das derivadas tem-se um perfil contínuo e suave para n . Ressalta-se que o comportamento assintótico próximo à $z^*=1$ é garantido nos testes realizados, não se observando na integração valores negativos para $n(z^*)$ nesta região.

Sabe-se que através do cálculo de n''' , em que $n'''=(f_1+f_2)/f_3$, condiciona-se a função $n(z^*)$ da equação (58) a pertencer a um conjunto $C^1[0,1]$ ou $C^2[0,1]$, se a função $n''(z^*)$ for descontínua ou contínua, respectivamente. A previsão do método de Runge-Kutta de quarta ordem é melhor obtida para uma função pertencente a um conjunto no mínimo C^4 . A equação (58) apresenta uma quarta derivada contínua considerando os raios de convergência da integração numérica entre os extremos do domínio de cálculo até o ponto de singularidade, $[0, z_d^*)$ e $(z_d^*, 1]$. A quarta derivada é obtida fazendo uso da identidade $(f/g)'=(f'g-fg')/g^2$. Isto produz $n''''=[(f_1+f_2)'f_3-(f_1+f_2)f_3']/f_3^2$. O denominador é então representado por:

$$f_3^2 = A^2 \left[4A^2 n^2 (1-n)^2 + 2An(1-n)(1-2n) + \frac{(1-2n)^2}{4} \right] j^2 \quad (73)$$

A equação (73) evidentemente se anula para a mesma relação expressa pela equação (64). Portanto nos raios de convergência acima relatados, a equação (58) pertence no mínimo a um conjunto C^4 .

Como já mencionado, a integração numérica “atravessou” o ponto de singularidade da direita para a esquerda durante os cálculos objetivando uma análise exploratória e, também, para averiguar a possibilidade de soluções viáveis. Uma vez que tais soluções foram localizadas avaliou-se melhor a integração numérica na região em torno do ponto de singularidade.

Foram realizados primeiramente testes de integração numérica iniciando em $z^*=0$ (da superfície) e avançando até $z^*=1$. Os valores dos contornos em $z^*=0$ utilizados foram aqueles valores obtidos para $n(0)$, $n'(0)$, $n''(0)$ e $n'''(0)$ das integrações numéricas realizadas a partir do seio fluido, mantidos os mesmos A , k e Δz^* . O objetivo foi localizar alguma alteração no comportamento da integração numérica ao “atravessar” o ponto de singularidade da esquerda para a direita devido a alguma consequência do próprio método numérico. Os valores dos perfis de n e suas derivadas para estes testes foram comparados com os valores dos perfis dos testes anteriores (como os perfis das figuras 13 a 18, por exemplo) mostrando concordância para todos os casos. Descartada, portanto, a possibilidade de alguma interferência do método numérico ao “atravessar” a singularidade pela esquerda ou pela direita e, conseqüentemente, a necessidade de utilizar um controle na integração numérica para efetuar correções, passou-se a analisar o comportamento dos perfis frente a diferentes discretizações do domínio de cálculo. Esta análise consistiu em avaliar os perfis gerados fixando A e k e variando Δz^* . A Tabela 4 apresenta os perfis obtidos para $k=0,0045$, $n'''(1)=-0,053$, e $A\approx 0,398$ para diferentes Δz^* .

Tabela 4 – Perfis de n, n', n'', n''' para diferentes Δz^* . $k=0,0045, A \approx 0,398, n'''(1)=-0,053$

Δz^*	n	n'	n''	n'''
5×10^{-4} (a)
1×10^{-3} (b)
2×10^{-3} (c)

Tabela 4 – Perfis de n , n' , n'' , n''' para diferentes Δz^* . $k=0,0045$, $A \approx 0,398$, $n'''(1)=-0,053$ (continuação)

Δz^*	n	n'	n''	n'''
4×10^{-3} (d)				
5×10^{-3} (e)				
1×10^{-2} (f)				

Tabela 4 – Perfis de n , n' , n'' , n''' para diferentes Δz^* . $k=0,0045$, $A \approx 0,398$, $n'''(1)=-0,053$ (continuação)

Δz^*	n	n'	n''	n'''
2×10^{-2} (g)
4×10^{-2} (h)
5×10^{-2} (i)

Pela análise da Tabela 4 observa-se que o comportamento de n não se mostra muito dependente da resolução adotada (valor de Δz^*). As derivadas, por sua vez, mostram poucas alterações quando a resolução é alta (menores valores de Δz^*). Em se diminuindo a resolução (maiores valores de Δz^*) as derivadas mostram que a perda da informação leva a perfis com diferentes evoluções (perfis g, h e i), mas diminuindo a influência para a primeira derivada e para a função propriamente dita. n''' tende para mais infinito pela direita e menos infinito pela esquerda em z_d^* , para altas resoluções, conservando o comportamento de n'' e n' . O efeito da discretização é tal que, com $\Delta z^*=5 \times 10^{-3}$ (perfis e), n''' tende para menos infinito tanto pela esquerda quanto pela direita e altera o comportamento de n'' e n' no tramo esquerdo ao ponto de singularidade.

Como mencionado, Kasnodzei et al (2013) e Souza et al (2013) independentemente obtiveram perfis contínuos para n''' ao usar valores baixos de A , o que foi associado a $f_1+f_2=0$. Entretanto, uma análise detalhada da supressão da descontinuidade não foi feita. No presente estudo, o comportamento diferenciado da função n''' reforçou a conveniência da análise do comportamento do numerador f_1+f_2 mais detalhadamente em torno do ponto de descontinuidade nos perfis em estudo, o que habilitou, adicionalmente, a análise detalhada da supressão da descontinuidade, conforme mostrado a seguir.

As figuras 19 e 20 apresentam o comportamento das funções f_1+f_2 e f_3 dos perfis (a) e (e) da Tabela 4, respectivamente.

Figura 19: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0045$, $A \approx 0,398$, $n'''(1) = -0,053$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Figura 20: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0045$, $A \approx 0,398$, $n'''(1) = -0,053$ e $\Delta z^* = 5 \times 10^{-3}$

Pela Figura 20 observa-se que a função f_1+f_2 apresenta um salto para um valor positivo quando se aproxima de z_d^* pela direita, levando a um comportamento diferente à esquerda daquele mostrado na Figura 19.

O comportamento das funções f_1+f_2 e f_3 dos perfis apresentados nas figuras 13 e 14 são expostos nas figuras 21 e 22, respectivamente.

Figura 21: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,002$, $A=0,39$, $n'''(1) = -0,0258$ e $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$

Figura 22: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0025$, $A=0,46$, $n'''(1) = -0,0297$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

As últimas figuras permitem observar comportamento da função f_1+f_2 similar àquele já descrito, com um comportamento distinto à direita e à esquerda do ponto singular. Outro fato a notar é que o comportamento da função f_3 é semelhante nos exemplos acima ilustrados. A função f_3 depende exclusivamente de A , n e n' , e seu comportamento atesta os perfis contínuos obtidos na integração numérica para n e n' .

Procurou-se então obter uma solução numérica para a equação (58) na qual a função f_1+f_2 iguala-se a zero quando f_3 também se anula. A Figura 23 exibe os perfis de n , n' , n'' e n''' para uma situação na qual $k=0,0016$, $A=0,3$, $n'''(1) = -0,0235$, $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$, $z_d^* \approx 0,119559$, $n_d \approx 0,638492$ e $n(0) \approx 0,999554$.

Na Figura 23 se observa um comportamento bastante suave de n''' à direita e à esquerda do ponto de singularidade, onde um pequeno “salto” ocorre. n'' , n' e n se apresentam de forma contínua e suave. A Figura 24 apresenta o perfil das funções f_1+f_2 e f_3 para este caso. Observa-se que o perfil da função f_1+f_2 é igualmente suave. Com o intuito de avaliar a possível continuidade no perfil de n''' , foram realizadas integrações numéricas com discretizações mais refinadas. O gráfico da Figura 25 exibe o “tamanho do salto” versus o Δz^* empregado. É possível concluir que quando Δz^* tende a zero, o “tamanho do salto” também tende a zero. O ponto mínimo presente na função do gráfico da Figura 25 e seu comportamento ascendente à esquerda deste é decorrente do erro de truncamento acumulado do cálculo quando da utilização de discretizações mais refinadas, este fato é já esperado e conhecido do Cálculo Numérico.

Figura 23: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,0016, A=0,3, n'''(1) = -0,0235$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Figura 24: Perfis de f_1+f_2 e f_3 . $k=0,0016, A=0,3, n'''(1) = -0,0235$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

Figura 25: Gráfico “tamanho do salto” versus Δz^* . $k=0,0016$, $A=0,3$ e $n'''(1) = -0,0235$

A Tabela 5 exibe informações para pontos principais ilustrados no gráfico da Figura 25.

Tabela 5 – “Tamanho do salto” no perfil de $n'''(z^*)$ para diferentes Δz^*

Δz^*	Erro em $n(0)$	“tamanho do salto”	$n'''(1)$
5×10^{-4}	-0,0446%	4,38201	-0,0235
1×10^{-4}	-0,0084%	2,95951	-0,0235
1×10^{-5}	+0,0409%	0,1988	-0,0235
1×10^{-6}	+0,0451%	0,37589	-0,0235
1×10^{-7}	+0,1%	0,51367	-0,023506

Foram realizadas integrações numéricas utilizando $\Delta A = 1 \times 10^{-3}$ obtendo-se resultados para n , n' , n'' e n''' similares àqueles já obtidos.

Os resultados expostos mostram que

- a equação (58) produz perfis aparentemente viáveis,
- as diferenças de comportamento, principalmente expressas nos perfis das funções $n''(z^*)$ e $n'''(z^*)$, são uma consequência dos valores diferenciados dos parâmetros A e k empregados,
- a função $n'(z^*)$ apresenta-se de forma contínua e que sua suavidade está relacionada à função $(f_1 + f_2)(z^*)$,
- quando $f_1 + f_2$ assume o valor zero em z_d^* tem-se a continuidade e suavidade das funções $n''(z^*)$ e $n'''(z^*)$, e

- v) quando $f_1 + f_2$ não assume o valor zero em z_d^* , n''' apresenta-se descontínuo e há um efeito no perfil de n'' .

Atendo-se ainda à averiguação da descontinuidade ocorrida em n''' e seus efeitos sobre as demais funções, foram realizados cálculos com Δz^* mais refinado no entorno de z_d^* , com integrações numéricas realizadas em ambas as direções, de (0,1) até $(\sim z_d^*, \sim n_d)$ e de (1, 0) até $(\sim z_d^*, \sim n_d)$.

No presente teste foi utilizada a integração numérica cujos perfis são aqueles apresentados na Figura 13, onde foi empregado $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$, os cálculos foram refinados no entorno de z_d^* utilizando $\Delta z^* = 1 \times 10^{-6}$. A Tabela 6 exhibe os valores para n e suas derivadas, obtidos à esquerda e à direita de z_d^* . As condições do teste foram $k=0,002$, $A=0,39$, $n'''(1) = -0,0258$, $n'''(0) \approx 4,086579$, $n(0) \approx 0,999872$, $z_d^* \approx 0,076671$, $\Delta z^*_{\text{primeiro}} = 5 \times 10^{-4}$, $\Delta z^*_{\text{segundo}} = 1 \times 10^{-6}$.

Tabela 6 – Valores de n , n' , n'' , n''' para teste realizado em ambas as direções: do gás para o seio líquido e do seio líquido para o gás.

À esquerda	n		À direita
$z^* = 0,076670$	$\approx 0,671945$	$\approx 0,671937$	$z^* = 0,076672$
n'			
$z^* = 0,076670$	$\approx -4,125470$	$\approx -4,125470$	$z^* = 0,076672$
n''			
$z^* = 0,076670$	$\approx 0,469163$	$\approx 0,924133$	$z^* = 0,076672$
n'''			
$z^* = 0,076670$	$\approx -88794,56$	$\approx 281149,0$	$z^* = 0,076672$

A integração com $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$ forneceu os valores nas posições $z^* = 0,0765$ (pela esquerda, iniciando-se em $z^* = 0$) e $z^* = 0,077$ (pela direita, iniciando-se em $z^* = 1$). A integração com $\Delta z^* = 1 \times 10^{-6}$ forneceu os valores nas posições $z^* = 0,07667$ (pela esquerda, iniciando-se em $z^* = 0,0765$) e $z^* = 0,076672$ (pela direita, iniciando-se em $z^* = 0,077$). A Figura 26, que é um croqui adaptado de Gonçalves e Schulz (2013), apresenta o esquema utilizado para este procedimento.

Os resultados da Tabela 6 mostram que n''' tende para $\pm\infty$, porém n'' apresenta valores aparentemente finitos em ambos os lados. Sabe-se que ocorre uma verticalização da função $n''(z^*)$ em torno de z_d^* , porém a mesma não tende (neste caso em análise) para $\pm\infty$, nestas circunstâncias a integral de n''' pode ser compreendida como uma integral imprópria convergente. Os perfis ilustrados na Figura 17, por exemplo, apresentam um caso em que a integral de n''' é inferida como um caso de integral imprópria divergente. A integral de n'' é vista como convergente, porque se tem um perfil contínuo da função $n'(z^*)$, o qual atinge o

mesmo valor para ambos os lados de z_d^* . Estas condições garantem a continuidade da função $n(z^*)$.

Figura 26: Esquema de procedimento de maior discretização no entorno de z_d^* . Adaptado de Gonçalves e Schulz (2013)

Conforme ilustrado pela Figura 27, o comportamento geral do perfil de n não é dependente do comportamento de suas derivadas de alta ordem. Porém, variações dos parâmetros adimensionais A e k ocasionam variações no perfil de n , contudo não afetando o seu aspecto geral.

Figura 27: Perfis de n para diferentes condições dadas pelos parâmetros A e k

4.3 Comparação dos Perfis Obtidos de n com Dados Experimentais

Conhecidos os aspectos da integração numérica referentes ao ponto de singularidade presente no domínio de cálculo devido à terceira derivada espacial de n , em especial a não dependência do perfil de n com as derivadas de ordem superior (garantindo a possibilidade do cálculo contínuo e a suavidade do perfil de n) compete, portanto, comparar as previsões obtidas com os dados experimentais de Janzen (2006) para averiguar a adequação daqueles. Como já referido, a definição prática de camada limite de concentração foi utilizada quando da comparação com os dados experimentais, ou seja, a espessura da camada limite adimensional é atingida quando $n=0,01$ ($\delta_c=1$). Foi realizada uma transformação linear para todas as abscissas das curvas das previsões obtidas para transladar a base das curvas conforme esta definição prática. É importante notar que não há vícios nos cálculos realizados, uma vez que esses foram realizados sem o intuito de reproduzir os dados experimentais. A Figura 28 apresenta os valores calculados e medidos para n , observa-se o comportamento similar entre eles.

Figura 28: Valores calculados e mensurados de n

Os dados experimentais de Janzen (2006) possuem um intervalo de valores experimentais k da ordem de $\sim 0,003 < k < \sim 0,004$. Pela Figura 28 se observa que os valores calculados de n seguem o comportamento dos valores medidos. Os perfis das figuras 17 e 23 encontram-se mais afastados dos dados experimentais, enquanto o perfil da Figura 14 possui boa superposição com os mesmos. Vale mencionar que a utilização de valores de k (no caso da Figura 28, $0,0015 \leq k \leq 0,004$) além do intervalo do k experimental também produzem perfis semelhantes e no entorno do envelope dos dados de Janzen (2006). Segundo Schulz et al (2011a), n pode ser estudado para diferentes níveis de turbulência, uma vez que k é um parâmetro dependente do nível de turbulência, através dos parâmetros E e K . Embora não enfatizado nos textos anteriores, eventualmente a função $\alpha(z^*)$ também pode ser dependente da turbulência. Isto se reflete no presente estudo através da variação do valor médio A .

A Figura 28 mostra que os valores calculados de n nos perfis das figuras 16 e 17 são significativamente diferentes entre si, apesar de utilizarem o mesmo valor de $k=0,004$. O perfil da Figura 16 utiliza um valor de $A=0,32$ e a Figura 17, $A=0,69$, neste caso o valor de A foi definido para uma situação de boa ou má superposição de n em relação aos dados experimentais. No capítulo 5 deste trabalho é apresentada a análise de sensibilidade do modelo em estudo.

4.4 Conclusões

As conclusões acerca dos resultados obtidos na solução numérica da equação (58) e a consequente análise do ponto de singularidade podem ser assim resumidamente apresentadas:

- A definição de $n(1)=0$, $n'(1)=0$ e $n''(1)=k$ produz um resultado para toda uma região de variação entre C_s e C_∞ ;
- No sentido da conclusão anterior, o contorno $n''(1)=k$, introduzido no presente estudo, mostrou-se fundamental para uma análise objetiva da função considerada;
- A terceira derivada do perfil adimensional de concentração pode apresentar comportamento para $\pm\infty$ no ponto singular, z_d^* , o que afeta a segunda derivada;
- A primeira derivada apresenta-se contínua, o que sugere que a integral da segunda derivada pode ser vista como um caso de integral imprópria convergente;

- Perfis contínuos e suaves para n são obtidos, independente do comportamento da segunda e terceira derivadas, para diferentes valores de A e k ;
- Os parâmetros A e k afetam fortemente o comportamento da segunda e terceira derivadas, mas não afetam a expectativa de comportamento de n ;
- Ao se considerar apenas a região até onde $n=0,01$, as previsões seguem o comportamento das medidas experimentais obtidas por experimentos em tanques de grades oscilantes.

5 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Neste capítulo é apresentada a análise de sensibilidade para o modelo unidimensional em estudo. A obtenção de todos os perfis de n , cujo comportamento segue a expectativa dos dados experimentais e que possibilitam a análise de sensibilidade para o modelo proposto segundo um determinado padrão de dados, foi possível através do uso da programação de computadores por linguagem compilada. Por último é apresentada a análise dos resultados obtidos para a equação (58) com a utilização da condição de contorno $n''(1)=0$.

5.1 Algoritmo

Os dados de entrada necessários para o início da solução numérica da equação (58) são os parâmetros adimensionais A e k , e o valor da terceira derivada de n em $z^*=1$, sendo definidos os valores limites e as variações desses parâmetros. Como se pode inferir, há um número considerável de combinações de dados de entrada a serem testados para a obtenção, e conseguinte averiguação, dos perfis resultantes. Torna-se necessário utilizar um algoritmo computacional que permita avançar através das possíveis combinações. Optou-se implantar esse algoritmo com a programação de linguagem compilada orientada a objetos C++ (desenvolvida por Bjarne Stroustrup na década de 1980), e o compilador *freeware* Dev-C++. A lista de procedimentos, na qual as instruções são executadas, pode ser visualizada no fluxograma da Figura 29.

Buscando economia de tempo na execução do algoritmo, admitiu-se que o valor da iteração atual da função n deveria ser superior ao da iteração anterior (lembrando que os cálculos foram iniciados no seio líquido e finalizados na superfície). Em não se satisfazendo essa condição, a integração numérica foi desconsiderada. Foram também descartadas as integrações numéricas nas quais em dez por cento (a partir de $z^*=1$) do domínio de cálculo a função n apresentou valor superior a 0,1 e nas quais em oitenta por cento do domínio a função apresentou valor inferior a 0,1.

Para as combinações avaliadas foram consideradas as seguintes condições padrão:

- $0,001 \leq k \leq 0,005$, com $\Delta k = 1 \times 10^{-4}$;
- Erro admitido para $n(0)$ de $\pm 0,1\%$;

Os perfis obtidos foram ainda selecionados para as condições em que $-50 < n'(0) \leq 0$. Nos dados experimentais de Janzen (2006), o valor de $n'(0)$ encontra-se em torno de -3. Com o objetivo de avaliar possíveis discrepâncias de comportamentos segundo variações diferentes para os demais dados, foram realizadas oito diferentes condições de teste, conforme especificados na Tabela 7, os quais deram origem a um assim denominado “catálogo de perfis”.

Tabela 7 – Diferentes condições de parâmetros para análise de sensibilidade

Δz^*	A	$n'''(1)$	Teste
1×10^{-3}	[0,01; 1,00] $\Delta A = 0,01$	[-0,080; -0,010] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-3}$	I
		[-0,0800; -0,0100] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-4}$	II
	[0,010; 1,000] $\Delta A = 0,001$	[-0,080; -0,010] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-3}$	III
		[-0,0800; -0,0100] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-4}$	IV
1×10^{-4}	[0,01; 1,00] $\Delta A = 0,01$	[-0,080; -0,010] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-3}$	V
		[-0,0800; -0,0100] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-4}$	VI
	[0,010; 1,000] $\Delta A = 0,001$	[-0,080; -0,010] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-3}$	VII
		[-0,0800; -0,0100] $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-4}$	VIII

5.2 Resultados e Análise de Sensibilidade

A análise de sensibilidade para a equação (58) foi desenvolvida para as “relações” observadas para o trio de parâmetros A , k e $n'''(1)$. Ressalta-se que para os testes definidos na Tabela 7 não houve discrepâncias para o comportamento das relações apresentadas nos resultados, ao contrário, houve uma tendência de multiplicação aproximadamente decimal (ou seja, dez vezes mais, nas condições de trabalho utilizadas) do número de soluções obtidas em relação aos parâmetros envolvidos (com exceção do parâmetro Δz^* , para o qual não houve

mudança considerável), conforme pode ser apreendido da Tabela 8. Esse fato consubstancia, portanto, um padrão de comportamento dito “multiplicativo” para a função n . Considerou-se o número de soluções como o número de perfis resultantes válidos dos testes realizados (I ao VIII).

Tabela 8 – Número de perfis soluções dos testes de análise de sensibilidade, $n(0)=1\pm0,1\%$

	$\Delta A=1 \times 10^{-2}$		$\Delta A=1 \times 10^{-3}$		$\Delta A=1 \times 10^{-2}$		$\Delta A=1 \times 10^{-3}$	
	Teste	Nº perfis	Teste	Nº perfis	Teste	Nº perfis	Teste	Nº perfis
$\Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-3}$	I	37	III	363	V	37	VII	344
$\Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$	II	350	IV	3478	VI	356	VIII	3410
$\Delta z^*=1 \times 10^{-3}$					$\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$			

Devido ao comportamento multiplicativo dos dados (nas condições empregadas) e o grande número de perfis gerados, são apresentados, na sequência, somente os resultados dos testes VI e VIII. Os resultados são expostos através de *gráficos de dispersão* e *gráficos de superfície* que representam as relações entre os parâmetros A , k e $n'''(1)$, e acrescentando também relações envolvendo o valor obtido de $n'(0)$. O Apêndice C apresenta os primeiros 1050 ($\approx 30\%$) perfis obtidos para o teste VIII.

As figuras 30 e 31 apresentam a relação $A \times k$ para os testes VI e VIII, respectivamente.

Figura 30: Gráfico $A \times k$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'''(1)= 1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1\pm0,1\%$

Figura 31: Gráfico $A \times k$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

As figuras 30 e 31 permitem observar que há um limite inferior para o valor de A , 0,27 e 0,266, para os testes VI e VIII, respectivamente. Desse limite inferior até aproximadamente 0,3, existe uma maior “densidade” de pontos indicativos de perfis válidos na relação para com k . A partir daí até o valor de A de aproximadamente 0,6 tem-se um aumento da dispersão dos pontos. Porém é observável que a densidade dos pontos, mesmo na condição de dispersão, aumenta com o valor crescente de k . Acima de $A=0,6$ há uma ainda maior dispersão dos resultados (ou seja, de perfis viáveis representados pelo par ordenado k, A). Os valores limites superiores para A foram 0,83 e 0,895 nos testes VI e VIII, respectivamente. Não houve resultados para valores de A acima de 0,9. Um fato notável é de que, no teste VIII, para $k=0,0044$ utilizando $\Delta A=1 \times 10^{-3}$ não se obtiveram soluções. Em relação a esse fato, é esperado que as soluções encontradas no teste VI estivessem “presentes” no teste VIII, esse é um problema de ordem computacional, no qual a utilização de um número declarado com algarismos nulos ao final da mantissa podem acarretar pequenos problemas de precisão devido à representação de ponto flutuante usado nos computadores (há uma variação na precisão computacional quando se trabalha com um valor declarado de $A=0,23$ e com um $A=0,230$, por exemplo). Mas esse fato é considerado, nesta altura dos testes, pouco

significativo. Entende-se que nesse caso não foi satisfeita a condição $n(0)=1\pm 0,1\%$, porém os resultados se encontraram próximos disso. Portanto, de fato quando $k=0,0044$ o comportamento descrito para a relação $A \times k$ é mantido, não se constituindo uma exceção. A Figura 32 ilustra para o teste VIII as regiões fronteiriças definidas.

Figura 32 Regiões da relação $A \times k$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

As figuras 33 e 34, a seguir, ilustram a relação de $A \times k$ considerando intervalos de $n'''(1)$. A observação dessas figuras permite concluir que para valores de A acima de $\approx 0,3$ existe uma região bem definida para os valores de $n'''(1)$, região na qual há um decréscimo regular dos valores de $n'''(1)$ para um acréscimo dos valores de k . Para a região com A entre $\approx 0,3$ e $\approx 0,6$, as faixas de variação de $n'''(1)$ possuem um giro angular no sentido crescente de k . Acima dessa região há uma tendência das faixas que representam os intervalos de $n'''(1)$ permanecerem ortogonais ao eixo das abscissas. Essas tendências parecem superpor-se com aquelas descrições das densidades de soluções viáveis anteriormente mencionadas e ilustradas na Figura 32.

Para a região de A entre $\approx 0,27$ e $\approx 0,3$, há uma relação “caótica” entre A , k e $n'''(1)$, mesmo assim é possível inferir que as relações se apresentam mais intrincadas para valores menores de k e menos intrincadas com o acréscimo deste. Valores de k superiores a 0,005 talvez conduzam a uma relação mais bem definida dos parâmetros para essa região de pequenos valores de A .

Na sequência, as figuras 35 e 36 ilustram a relação de A , k e $n'(0)$. O conhecimento do valor da primeira derivada do perfil normalizado de concentração junto à superfície é de grande interesse na área de estudos de fenômenos de transporte interfaciais.

Figura 33: Gráfico $A \times k$ e $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

Figura 34: Gráfico $A \times k$ e $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

Figura 35: Gráfico $A \times k$ e $n'(0)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

Figura 36: Gráfico $A \times k$ e $n'(0)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

Enquanto $n'''(1)$ possui uma relação de acréscimo (ou decréscimo) para com k , agora tem-se uma relação de acréscimo (ou decréscimo) de $n'(0)$ para com A . Porém esta última relação não é “monotônica” ou “regular”, se assim se pode usar os termos. Há agora um decréscimo dos valores de $n'(0)$ para um acréscimo dos valores de A , num aspecto geral, mas não de forma contínua. Em toda a região de soluções existem pontos específicos onde $n'(0)$ atinge valores antecipadamente menores (para o acréscimo de A) aos da maioria dos pontos de uma região particular. Observa-se que para a região com A entre $\approx 0,27$ e $\approx 0,6$ (onde há mais soluções) os valores para $n'(0)$ ficam entre ≈ 0 e $-12,5$.

As figuras 37 e 38 ilustram os gráficos de dispersão $A \times k \times n'''(1)$ para os testes VI e VIII, respectivamente. É possível observar pela Figura 38 que a região no entorno de $A \approx 0,3$ possui uma considerável gama de combinações de k e $n'''(1)$. Essa região foi considerada “caótica” nas figuras “planares” 33 e 34, sendo agora, nos gráficos com 3 dimensões, possível observar que existe uma superfície de convergência dos resultados que é projetada sobre os planos anteriormente descritos. Infere-se das figuras 37 e 38 que valores crescentes de A levam a um acréscimo de $n'''(1)$, sendo este acréscimo mais acentuado para valores baixos de k e menos acentuado caso contrário, na região comentada. O conjunto das trinas ordenadas $(k, A, n'''(1))$ produzem agora uma superfície bem definida.

Por último, as figuras 39 e 40 mostram para os gráficos $A \times k \times n'''(1)$ (figuras 37 e 38) os intervalos de valores de $n'''(1)$ na superfície obtida.

Figura 37: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

Figura 38: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0, 1\%$

(a)

(b)

Figura 39: Gráfico $A \times x \times n'''(1)$ com a variação de $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

(a)

(b)

Figura 40: Gráfico $A \times k \times n'''(1)$ com a variação de $n'''(1)$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

5.3 Valor nulo para a Segunda Derivada em $z^*=1$

As integrações numéricas realizadas inicialmente, conforme exposto no capítulo 4, permitiram observar que valores próximos a zero para a segunda derivada em $z^*=1$, utilizados como condição de contorno, não possibilitaram a obtenção de perfis adequados de n . Foi notado que valores de $k < 0,001$ geravam perfis com valores muito aquém do valor unitário para $n(0)$ ou, então, valores tendendo ao infinito próximo a $z^*=1$. Com a utilização do algoritmo implementado na linguagem C++ tornou-se possível realizar uma varredura de possíveis perfis para esta região de valores de k e, assim, constatar as conclusões para as previsões iniciais que sugeriam que a condição de contorno $n''(1)=0$ para a equação (58) não seria adequada à representação do fenômeno físico em estudo. Essa análise foi realizada utilizando as seguintes condições:

- $1 \times 10^{-5} \leq k (= n''(1)) < 0,001$, com $\Delta k = 1 \times 10^{-4}$;
- $0,01 \leq A \leq 1$, com $\Delta A = 1 \times 10^{-2}$;
- $-0,08 \leq n'''(1) \leq -0,01$, com $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-2}$;
- $0 \leq z^* \leq 1$, com $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$.

A Figura 41 exibe os perfis obtidos para $0,01 \leq A \leq 0,25$. Os demais perfis seguem a tendência geral dos perfis apresentados na Figura 41 e foram suprimidos para evitar uma sobrecarga no gráfico apresentado pela mesma.

Observa-se que grande parcela dos perfis gerados tende para infinito no começo da integração numérica (isto é, em $z^*=1$). Os demais apresentam valores aquém do valor unitário para $n(0)$. Essas condições atestam a não adequação do contorno $n''(1) \approx 0$ e auxiliam na compreensão da região em que não há um comportamento bem definido (valores baixos de k e A) na análise de sensibilidade dos parâmetros envolvidos, conforme inferido nas figuras da seção 5.2.

De um modo geral, valores próximos a zero para k induzem comportamentos complexos (ou intrincados) da equação (58) para os quais não há a obtenção de perfis válidos de n , enquanto que valores de k entre 0,001 e 0,005 levam a comportamentos mais bem definidos, para os quais é possível obter perfis de n com boa adequação aos dados experimentais da literatura. Uma justificativa física para a não obtenção de perfis válidos para $k \approx 0$ é que nessas condições ou o coeficiente de transferência interfacial, K , é próximo a zero ou $z_2 \approx z_1$. No primeiro caso, não haveria incorporação do escalar e , no segundo caso, não haveria uma espessura onde a concentração pudesse variar (não haveria camada limite de concentração).

Figura 41: Perfis de n para $0,01 \leq A \leq 0,25$ e $1 \times 10^{-5} \leq n''(1) < 1 \times 10^{-3}$. $\Delta k = 1 \times 10^{-4}$, $\Delta A = 1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-2}$ e $\Delta z^* = 5 \times 10^{-4}$

Observa-se na Figura 41 que há uma organização na evolução dos perfis, como se estivessem agrupados “em feixes”. Esse agrupamento possui a tendência de redução do espaçamento dos “nós dos feixes” em direção à $z^*=1$. Contudo, observou-se que esses agrupamentos de perfis não seguem uma regra sequencial do tipo “da direita para a esquerda” ou “da esquerda para a direita” quanto aos valores de A , k e $n'''(1)$, por exemplo. Durante a obtenção gráfica dos perfis observou-se uma aparente aleatoriedade quanto ao posicionamento de cada novo perfil, aparecendo o comportamento organizado (Figura 41) quando do agrupamento final dos perfis. Eventualmente haja um ordenamento na sua disposição sequencial, mas esse aspecto não foi aqui explorado por não ser do escopo do presente estudo.

5.4 Conclusões

A análise de sensibilidade para a equação (58) desenvolvida ao longo deste capítulo possibilitou as seguintes conclusões:

- O conjunto dos pontos obtidos para a tríade A, k e $n'''(1)$ de perfis considerados válidos produzem uma superfície bem definida com relações observáveis entre os parâmetros envolvidos;
- A multiplicidade dos dados comparativamente às condições definidas para os parâmetros de controle da integração numérica atesta para um padrão de comportamento dito “multiplicativo” da equação (58).
- Valores de A inferiores a $\approx 0,27$, e superiores a $\approx 0,9$ não possibilitaram a geração de perfis válidos. Na região em que $\approx 0,27 < A < \approx 0,6$, há uma maior definição das relações entre os parâmetros envolvidos na integração numérica. Valores crescentes de A e k , nessa região, levam a uma maior geração de perfis n válidos segundo os critérios aqui estabelecidos. Esses perfis apresentam valores para $n'(0)$ entre $-12,5$ e ≈ 0 .
- Em geral, para os perfis obtidos, valores crescentes de k levam a valores decrescentes de $n'''(1)$, valores crescentes de A levam a valores crescentes de $n'''(1)$ apresentando maior acentuação dessa relação quando se tem baixos valores de k e menor acentuação para valores maiores e, por último, valores crescentes de A levam a valores decrescentes de $n'(0)$.
- Valores de A próximos a $0,3$ apresentam relações mais intrincadas para a tríade de parâmetros analisada, sendo esse aspecto mais acentuado quando se tem valores de k próximos a $0,001$.
- A região onde $\approx 0 < k < \approx 0,001$ não apresentou perfis válidos e a definição de valor nulo para $n''(1)$ não é adequada ao fenômeno em análise. A evolução dos perfis, nessa região, leva a valores inferiores ao valor unitário em $z^*=0$, ou valores que tendem a infinito em z^* próximo a 1 .

6 EQUAÇÃO DE SEGUNDA ORDEM PARA n E ANÁLISE DO CONTORNO DECORRENTE DA OPERAÇÃO DE EXTRAPOLAÇÃO PRÁTICA

Neste capítulo é apresentada a obtenção e análise, concernente à validade e consequente sugestão de uso, de uma equação de segunda ordem (também dita integrada) para o perfil de n . Na sequência é analisado o uso do contorno elementar para a segunda derivada em $z^*=0$ em decorrência do procedimento experimental realizado junto à interface comumente empregado na área.

6.1 Equação de Segunda Ordem para representação do Perfil de Concentrações

A utilização de uma equação diferencial não-linear de segunda ordem, que emprega as mesmas considerações da metodologia de OQAs definidas no capítulo 2, é considerada nesta dissertação. A equação de segunda ordem foi fornecida como informação pessoal por Schulz⁶. Sua obtenção é aqui detalhada a partir do sistema de equações (57), reapresentado abaixo:

$$\left. \begin{aligned} 1 - n &= \frac{1}{k} \frac{d^2 n}{dz^{*2}} - \frac{d(IJ^*)}{dz^*} \\ -n(1-n)A^2 + (IJ^*) \frac{dn}{dz^*} + \frac{A}{2} \frac{d}{dz^*} [(IJ^*)(1-2n)] &= -\frac{2}{k} n(1-n)A^2 \frac{d^2 n}{dz^{*2}} \end{aligned} \right\} \quad (74)$$

As duas equações presentes no sistema de equações (74) são as equações (13) e (28) escritas segundo parâmetros do método de OQAs e em formato adimensional, onde:

⁶ Informação fornecida por Schulz em São Carlos, 2013.

$$IJ^* = \frac{n(1-n)A\sqrt{w'^2}}{KE \sqrt{n(1-n) + \frac{\beta(1-\beta)}{(2\beta-1)^2}}} \quad (75)$$

A integração da primeira equação do sistema de equações (74) e sua resolução em relação ao termo IJ^* é:

$$IJ^* = \frac{1}{k} \frac{dn}{dz^*} - z^* + \int ndz^* + C \quad (76)$$

As definições da primeira equação do sistema de equações (74) e da equação (76) são empregadas na segunda equação do sistema de equações (74), obtendo-se a equação final:

$$\begin{aligned} & -A(1-n) \left[An + \frac{(1-2n)}{2} \right] + \left[\frac{1}{k} \frac{dn}{dz^*} - z^* + \int ndz^* + C \right] (1-A) \frac{dn}{dz^*} \\ & = -\frac{A}{2k} [4An(1-n) + (1-2n)] \frac{d^2n}{dz^{*2}} \end{aligned} \quad (77)$$

A equação (77) apresenta as mesmas características gerais da equação de terceira ordem já discutida, desenvolvida para a mesma situação física, obtendo-se, também, o mesmo ponto de singularidade. As variáveis possuem o mesmo significado da equação (58), apenas entrando uma constante de integração, C , considerada como um fator de calibração.

Com o objetivo de verificar a validade da equação (77), para indicação de sua utilização em estudos posteriores, foi realizado um estudo de comparação que satisfizessem os contornos determinados na Figura 10a, considerando diferentes condições. Em outras palavras, buscou-se uma igualdade entre os resultados obtidos pela integração numérica da equação (77) considerando os contornos definidos na Figura 10a com os perfis admitidos válidos que constituem o “catálogo de perfis”, ao mesmo tempo em que esses resultados servem de comprovação às previsões efetuadas com a equação (58). As questões referentes aos contornos provindos dos procedimentos experimentais, apresentados na Figura 10b, são decorridas na sequência.

Os perfis considerados válidos foram obtidos com a integração numérica da equação (58) iniciando-se em $z^*=1$, aonde, conforme discussões já realizadas, obteve-se uma condição de

contorno adicional, $n''(1)=k$, que se mostrou adequada. É necessário, portanto, observar essa condição para a equação (77). A equação (77) em $z^*=1$ ($n(1)=0$, $n'(1)=0$) se torna:

$$-\frac{A}{2} = -\frac{A}{2k} \frac{d^2n}{dz^{*2}} \Big|_1 \quad \text{ou} \quad \frac{d^2n}{dz^{*2}} \Big|_1 = k \quad (78)$$

É importante notar que não só houve a compatibilidade da condição de contorno adicional utilizada nas análises já realizadas, como a comprovação da validade desse contorno, uma vez que a equação de segunda ordem define matematicamente uma única possibilidade de contorno para a segunda derivada. A equação de terceira ordem definia matematicamente a possibilidade do valor nulo ou k para a segunda derivada em $z^*=1$, e as previsões e análises realizadas nos capítulos 4 e 5 concluíram pela adequação da utilização da segunda opção e inadequação da primeira.

Novamente, não é possível a obtenção de um contorno específico em $z^*=0$ ($n(0)=1$). O contorno, em sua forma completa, pode ser escrito como:

$$\left[\frac{1}{k} \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 + \int ndz^* + C \right] (1-A) \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = \frac{A}{2k} \frac{d^2n}{dz^{*2}} \Big|_0 \quad (79)$$

Para a integração numérica da equação (77) foi considerado o seguinte sistema de solução (semelhante ao já empregado na equação (58)):

$$\begin{cases} \frac{dn}{dz^*} = j, \frac{dj}{dz^*} = w = \frac{f_1 + f_2}{f_3}, \quad I = \int ndz^* & \text{onde} \\ f_1 = -A(1-n) \left[An + \frac{(1-2n)}{2} \right], \\ f_2 = \left[\frac{1}{k} j - z^* + I + C \right] (1-A)j, \\ f_3 = -\frac{A}{2k} [4An(1-n) + (1-2n)]. \end{cases} \quad (80)$$

A integração numérica segue, também, o procedimento empregado para a equação (58), ou seja, utiliza-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem para o cálculo dos pontos definitivos da evolução dos perfis e o método de quasi-Newton para o cálculo dos pontos

auxiliares secundários. O cálculo dos pontos auxiliares secundários para a variável I , por exemplo, ficam assim definidos:

- $I_{i-1/2}^a = I_i - (\Delta z^*/2) n_i$
- $I_{i-1/2}^b = I_i - (\Delta z^*/2) n_{i-1/2}^a$
- $I_{i-1} = I_i - \Delta z^* n_{i-1/2}^b$

Todas as condições de contorno em $z^*=1$ são conhecidas:

- $I(1)=0$;
- $n(1)=0$;
- $j(1)=0$;
- $w(1)=k$.

Isso permite o desenvolvimento de uma programação de computador com algoritmo semelhante ao ilustrado na Figura 29, mas ao invés de variar a tríade de parâmetros A , k e $n'''(1)$, varia-se agora a tríade A , k e C . Ao final da integração numérica, busca-se obter o valor de $n(0)=1$ com uma determinada margem de erro. No entanto, os valores possíveis para a constante de integração (fator de calibração) possuem uma grande faixa de variação possível nas diferentes situações observadas. Isto se verifica, por exemplo, observando que a maior parte dos valores encontra-se entre $\sim 0,7$ e ~ 8.000 , mas havendo alguns valores ainda maiores ou mesmo outros negativos, conforme os testes iniciais realizados em planilha de cálculo Microsoft Excel[®].

Uma vez que perfis viáveis foram possíveis de serem obtidos, procurou-se por uma comparação entre as predições realizadas pelas equações (58) e (77). Essa comparação foi realizada através da escolha de um determinado perfil obtido pela equação (58) com especial atenção aos valores de $n(0)$ e $n'(0)$, para os quais se procurou uma igualdade com a predição da equação (77). Os parâmetros A e k foram mantidos constantes e iguais às duas predições e variavam-se os parâmetros de entrada $n'''(1)$ e C , para a equação de terceira e segunda ordem, respectivamente. Foram utilizados dois programas em linguagem compilada C++, um para a equação (58) e outro para a equação (77). As condições comuns de ambas as predições foram:

- $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$;
- $A=0,4$;
- $k=0,003$;
- $n(0)=1 \pm 1 \times 10^{-4}$.

Foi acrescida na análise uma estimativa para o valor da terceira derivada em $z^*=1$ através da equação (81), para comparação posterior com o valor de $n'''(1)$ utilizado na equação (58). Conforme segue:

$$w_{i-1/2}^a = w_i - \frac{\Delta z^*}{2} n'''_{i, estimado} \quad (81)$$

$$n'''_{i, estimado} = -\frac{2}{\Delta z^*} (w_{i-1/2}^a - w_i) = \frac{2}{\Delta z^*} \left(k - \frac{f_1^a_{i-\frac{1}{2}} + f_2^a_{i-\frac{1}{2}}}{f_3^a_{i-\frac{1}{2}}} \right) \quad (81a)$$

Note que a parcela $f_2^a_{i-1/2}$ na equação (81a) contém os parâmetros I e C (veja o sistema de equações (80)). A Tabela 9 apresenta os resultados obtidos no teste de comparação.

Tabela 9 – Resultado do teste de comparação para $n'''(1) \approx -0,036319$ e $C \approx 1346,170889$. $A=0,4$, $k=0,003$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$

Equação	Valor ajustado		$n(0)$	$n'(0) = j(0)$	$n'''_{i, estimado}$
	$n'''(1)$	C			
(58)	$\approx -0,036319$	-	$\approx 1,000030$	$\approx -6,406517$	-
(77)	-	$\approx 1346,170889$	$\approx 1,000099$	$\approx -6,406508$	$\approx -0,036319$

Um segundo passo para o teste de comparação foi avaliar a evolução dos perfis de n , n' e n'' da equação (58) e comparar com a evolução dos perfis n , $j=n'$ e $w=n''$ da equação (77), tanto visualmente, através dos gráficos dos mesmos, quanto analiticamente, em se calculando os desvios para cada ponto z^* de cada um dos perfis avaliados. Os gráficos mostraram-se coincidentes, a Figura 42 apresenta a evolução dos mesmos (onde se observa também a validade do perfil obtido). A Tabela 10 apresenta os resultados para o maior e menor valor de desvio em módulo e o desvio acumulado para as funções em análise em relação às funções da equação (58).

Tabela 10 – Maior e menor desvio em módulo e desvio acumulado para os perfis das funções $n(z^*)$, $n'(z^*)$ e $n''(z^*)$. $n'''(1) \approx -0,036319$, $C \approx 1346,170889$, $A=0,4$, $k=0,003$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$

Função	Desvio (em módulo)		Desvio acumulado
	Menor	Maior	
$n(z^*)$	0	7×10^{-5}	0,114393
$n'(z^*)$	0	$4,04 \times 10^{-4}$	-0,69842
$n''(z^*)$	0	$1,297 \times 10^{-2}$	-0,517

Figura 42: Perfis de n , n' e n'' . $k=0,003$, $A=0,4$, $n'''(1) \approx -0,036319$, $C \approx 1346,170889$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$

Conclui-se, por conseguinte, que as equações (58) e (77) representam a mesma situação. Portanto, a equação (77) é válida para a representação do fenômeno em estudo e, devido sua simplicidade em comparação com a equação (58), ela é indicada para utilização nos estudos posteriores acerca do fenômeno e do método de OQAs.

Os testes designados de I a VIII (definidos na Tabela 7) para a equação (58), que geraram o “catálogo de perfis”, foram refeitos considerando agora o cálculo da função $I(z^*)$ além das demais funções inerentes à equação (58). Tal procedimento teve por objetivo estimar um valor para o fator de calibração C (uma informação adicional para o “catálogo de perfis”). É importante observar que o cálculo de C partiu de resultados obtidos na integração numérica da equação (58) e constituem, portanto uma estimativa para o seu valor (que contribuirá para estudos futuros envolvendo a equação (77)). Empregou-se esse procedimento devido à prévia catalogação dos perfis considerados válidos e visando contornar o problema do grande espectro de valores que o fator de calibração C apresenta. O cálculo de C foi obtido através da equação (82) na posição $z^*=0$:

$$C = \frac{A}{2k(1-A)} \frac{n''(0)}{n'(0)} - \frac{n'(0)}{k} - I(0) \quad (82)$$

Na equação (82) os valores de n' e n'' em $z^*=0$ são aqueles obtidos através da integração numérica da equação (58). O valor de C é apresentado nos perfis do Apêndice C.

A Figura 43 apresenta a relação entre $A \times k \times C$ para o teste VIII. Observa-se que existe uma região mais bem definida para valores de C quando $A < 0,6$, contudo valores de k próximos a 0,001 levam a instabilidades.

Figura 43: Gráfico $A \times k \times C$. $\Delta k=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$, $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$ e $n(0)=1 \pm 0,1\%$

6.2 Parâmetros IJ^* e β

Nos trabalhos desenvolvidos com a equação (77) tornou-se possível analisar o provável comportamento do parâmetro β em decorrência de IJ^* . A equação (76) apresenta a resolução para IJ^* . Pela equação (75) é possível observar que o termo IJ^* pode se anular nos contornos, porém quando da análise da equação (76) há a definição de um valor não nulo nos contornos, como se segue:

$$IJ^*(1) = C - 1 \quad (83)$$

$$IJ^*(0) = \frac{n'(0)}{k} + I + C \quad (84)$$

Essa situação leva a consideração de que o parâmetro IJ^* apresenta uma indeterminação matemática (0/0) nos contornos. A indeterminação matemática é possível nos contornos se a função coeficiente de superposição β assumir, nesses pontos, os valores 0 ou 1. Na definição de IJ^* entram, como parâmetros de valores desconhecidos, o RMS de flutuação de velocidade e β . Não é possível o cálculo desses parâmetros em separado. Sabe-se somente que o RMS de flutuação de velocidade é nulo em $z^*=0$ e tal condição mantém a indeterminação matemática para IJ^* .

Não é possível, *a priori*, inferir os valores de IJ^* no começo e no final da camada limite. Portanto, pelas equações (76), (83) e (84), é aceitável observar que ao se ajustar o valor do fator de calibração C implicitamente se ajusta o valor outrora indeterminado de IJ^* no contorno.

Com o intuito de exemplificação, a Figura 44 ilustra a evolução do parâmetro IJ^* para o perfil de n exposto na Figura 13. O parâmetro IJ^* não possui uma definição física, é simplesmente uma relação (sem definição teórica) entre os parâmetros n , A , β e $\sqrt{w'^2}$.

Figura 44: Perfil de IJ^* . $k=0,002$, $A=0,39$, $n'''(1) = -0,0258$ e $\Delta z^*=5 \times 10^{-4}$

As definições dadas pelas equações (34), (39) e (41), considerando também, por analogia, os entendimentos teóricos das equações (24), (30), (35) e (36), inferem que em $z^*=0$ tem-se $n=m=1$ e, portanto $\beta=1$, e em $z^*=1$ tem-se $n=m=0$ e $\beta=1$. Desconhece-se, no momento, a

evolução da função $\beta(z^*)$, mas infere-se que seja menor que 1 em se afastando dos contornos. A função $\beta(z^*)$, se se admitir que distante da interface não deve haver sobreposição preferencial dos registros de concentração e velocidade, deveria tender para um valor médio ($\sim 0,5$) ao final da camada limite. Nesse sentido, o comportamento aqui apontado para $\beta(z^*)$ não é esperado, contudo é um comportamento possível pelas equações. Essas condições podem ser decorrentes por se ter admitido A constante, e, em uma condição com A variável eventualmente esse comportamento não esperado da função $\beta(z^*)$ possa ser suprimido. É importante notar, também por consequência do parâmetro A constante, que o perfil de IJ^* na Figura 44 apresenta um valor nulo no ponto de singularidade, o que não era inicialmente esperado, a menos que o RMS de velocidade se apresente nulo nesse ponto. Junto à interface até o ponto de singularidade o perfil de IJ^* apresenta-se negativo, o que determina um RMS de velocidade negativo nesta região. Sem dúvida é sabido que o valor RMS, sendo estatisticamente apenas um desvio padrão, pode assumir valores negativos e positivos. Trata-se, estatisticamente, de uma medida do desvio em relação ao valor médio, podendo esse desvio ser $\pm$ RMS. A questão física dessa inversão é que deve ainda ser analisada com mais cuidado, sendo que isto pode inserir limitações quanto às soluções já obtidas.

6.3 Contorno decorrente da Operação de Extrapolação Prática

Apresentados os estudos e análises decorrentes da nova condição de contorno em $z^*=1$ compete agora analisar a validade do contorno adicional em $z^*=0$ decorrente dos procedimentos experimentais. Como já referido no capítulo 3, o procedimento experimental consiste na operação prática de extrapolação linear de valores de concentração próximos à interface e, por conseguinte, tem-se que a derivada segunda é nula na superfície. Em sendo válida essa operação prática, torna-se possível a obtenção de uma relação fixa entre a derivada terceira e a derivada primeira, como definido na equação (61b), e, também, a definição da terceira derivada dada pela equação (65c). Essas relações adicionais não são operacionais para se efetuar os cálculos da integração numérica da equação (58), mas é efetivo para se estabelecer qual solução (ou quais soluções) é mais adequada ao procedimento experimental. Em suma, trata-se de um contorno de extrapolação condicionado à validade da operação

prática. As figuras 10b e 10c (capítulo 3) ilustram as condições de contorno conhecidas e estimadas para essa situação.

O catálogo de perfis (teste VIII, definido no capítulo 5) obtido no estudo da análise de sensibilidade da equação (58) consistiu no conjunto de soluções viáveis para as quais se procurou localizar aquelas mais prováveis em relação à operação prática.

Uma observação inicial das soluções presentes no catálogo de perfis mostrou que há algumas soluções nas quais a derivada segunda em $z^*=0$ é efetivamente próxima a zero (considerando valores menores que 10^{-6}). No entanto, essas mesmas soluções possuem também derivadas primeiras próximas a zero na origem. Tal condição parece mostrar que, se há inflexão na curva, ela não ocorre na origem. Contudo, procurou-se inicialmente validar a operação prática em relação às soluções já obtidas antes de se ajuizar prévias conclusões.

Com o intuito de exemplificação do estudo em análise, as informações adicionais decorrentes da equação (77) aplicada às condições práticas em $z^*=0$, são:

$$\left[\frac{1}{k} \frac{dn}{dz^*} \right]_0 + I(0) + C \left(1 - A \right) \frac{dn}{dz^*} \Big|_0 = 0 \quad (85)$$

Portanto, tem-se que:

- ou $n'(0)=0$ (que é uma tendência observada no catálogo de perfis);
- ou $A=1$ (uma condição ideal onde a função coeficiente de redução é nula, pouco físico);
- ou $n'(0)=-k(I(0)+C)$ (possíveis perfis viáveis em que a derivada primeira seria não nula).

A condição de $n'(0)=0$ confere com as tendências observadas no catálogo de perfis, mas pode implicar em erros no valor da razão calculada. Para a possibilidade de uma razão não nula, de acordo com a equação (61b), deve-se também ter a derivada terceira nula configurando assim uma indeterminação matemática. Alguns perfis obtidos de fato apresentam essa tendência, no entanto, a primeira derivada ser nula implica, juntamente com o fluxo turbulento nulo, que não há fluxo na interface ar-água, o que não é fisicamente viável. Portanto, tais perfis são válidos matematicamente, porém não adequados fisicamente, reduzindo assim o escopo de resultados válidos para as soluções já obtidas.

Para a análise da validade do contorno elementar procedido da operação prática resta a possibilidade dada por $n'(0)=-k(I(0)+C)$ (ou $n'(0)=-kC$ para $I(0) \ll C$). Para tal buscou-se aqueles perfis em que há a possibilidade de derivada segunda nula para os resultados que

apresentam trocas de sinais para a derivada segunda, e derivada primeira não próxima à zero. Nesses perfis a derivada primeira fica geralmente próxima à -3 (coincidente ao valor utilizado anteriormente como possibilidade de integração por Schulz et al, 2011a, 2011b).

Em suma, o procedimento seguido foi:

- Verificar os valores da derivada segunda para o teste VIII do catálogo de perfis. Valores próximos a zero e trocas de sinais foram destacados dos demais.
- Os valores próximos a zero levam a derivadas primeiras próximas a zero (o que não é fisicamente viável, portanto esses perfis foram descartados juntamente com os outros nos quais a derivada segunda é distante de zero).
- Os valores obtidos em torno da troca de sinal da derivada segunda parecem levar à possibilidade de derivadas primeiras não nulas e, portanto foram realizadas análises para esses perfis na busca da averiguação dessa possibilidade.

Se encontrada essa possibilidade, é possível inferir que o contorno elementar leva a resultados observáveis que justificam o procedimento experimental. Isso reduziria o conjunto de soluções, mas ainda lembrando que, neste momento, não se está buscando uma solução “mais” realística e, sim, uma solução fundamentada em um procedimento empírico. O que se pode inferir inicialmente é que há a possibilidade de um número menor de valores de A para cada valor de k (talvez apenas um).

Uma avaliação inicial foi realizada aplicando todas as derivadas em $z^*=0$ na equação (61) procurando avaliar o tamanho do erro em se utilizando o valor de $n'''(0)$ obtido pela integração numérica e o valor obtido pela relação expressa pela equação (61a). Os resultados foram diversos, havendo para muitos a adequação no resultado da equação (61). Contudo foi possível observar que havia diferenças entre os valores de $n'''(0)$ obtido na integração numérica em comparação aos valores obtidos para a relação entre derivada, mesmo nos resultados mais adequados à equação (61). A Tabela 11 exhibe os resultados mais adequados que ocorrem para o valor de $k=0,001$ ficando A limitado entre $\approx 0,26$ e $\approx 0,3$. Na análise foram utilizados $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$, $\Delta A=1 \times 10^{-3}$ e $-0,08 < n'''(1) < -0,01$ com $\Delta n'''(1)=1 \times 10^{-4}$.

Em razão da diferença apresentada para os valores obtidos de $n'''(0)$, e de se estar trabalhando com A constante, não foram realizadas análises mais aprofundadas. Os esforços ficaram em encontrar uma situação válida entre os resultados que apresentam troca de sinal para a segunda derivada.

Tabela 11 – Valores de $n'''(0)$ obtidos pela integração numérica e pela equação (61a) para $k=0,001$

A	$n'''(1)$	$n'(0)$	$n''(0)$	$n'''(0)$		Equação (61) c/ $n'''(0)$	
				Int. numérica	Equação (61a)	Int. numérica	Equação (61a)
0,266	-0,0432	-2,9E-09	-1,9E-09	-8,2E-08	1,3687E-12	-2,5183E-13	-2,5186E-13
0,266	-0,0482	-8,1E-09	-1,9E-11	-9,0E-10	3,8014E-12	-2,4914E-15	-2,4924E-15
0,268	-0,0323	-9,7E-07	-3,2E-05	-1,0E-03	4,5234E-10	-4,2256E-09	-4,3586E-09
0,268	-0,0697	-5,8E-09	-3,9E-14	-2,6E-18	2,6951E-12	-5,1825E-18	-5,1846E-18
0,269	-0,0333	-3,8E-07	-1,3E-05	-4,2E-04	1,7581E-10	-1,6824E-09	-1,7038E-09
0,271	-0,0325	-7,4E-07	-2,4E-05	-7,7E-04	3,3854E-10	-3,2105E-09	-3,2879E-09
0,273	-0,0648	-5,6E-09	-4,0E-14	-2,0E-16	2,5575E-12	-5,3886E-18	-5,3906E-18
0,275	-0,0340	-1,8E-07	-6,1E-06	-2,1E-04	8,0605E-11	-8,3229E-10	-8,3736E-10
0,276	-0,0268	-1,2E-04	-3,2E-03	-8,5E-02	5,3115E-08	-4,3761E-07	-1,8239E-06
0,280	-0,0395	-3,3E-09	-4,0E-08	-1,6E-06	1,4405E-12	-5,6609E-12	-5,6616E-12
0,283	-0,0451	-1,5E-09	-2,4E-10	-1,1E-08	6,5186E-13	-3,3979E-14	-3,3981E-14
0,290	-0,0617	-3,3E-09	-2,3E-14	-2,7E-15	1,3884E-12	-3,2690E-18	-3,2697E-18

Foram refinados os valores de A na integração numérica para um valor igual de k entre dois perfis onde ocorre a mudança de sinal para a segunda derivada. Vários pares foram testados e não se obteve (contrário ao esperado) uma aproximação nula para a segunda derivada. De forma exemplificativa a Tabela 12 apresenta os resultados de um desses testes para $k=0,0045$.

De modo geral, as condições para esses testes foram:

- $0,001 \leq k \leq 0,005$, $\Delta k = 1 \times 10^{-4}$;
- $0,01 \leq A \leq 1,00$, $\Delta A = 1 \times 10^{-3}$;
- Erro admitido para $n(1) = 0 \pm 0,1\%$;
- $\Delta z^* = 1 \times 10^{-4}$.

Tabela 12 – Valores obtidos com o refino de A para uma região onde ocorre mudança de sinal da segunda derivada, $k=0,0045$

ΔA	A	$n'''(1)$	$n'(0)$	$n''(0)$	$n'''(0)$	
					Int. numérica	Equação (61a)
Ref.	0,324	-0,0582	-3,083688	-0,24917	0,6555683	0,004884562
1×10^{-5}	0,32405	-0,0579	-3,380634	4,120358	-17,16312	0,005353403
1×10^{-6}	0,324001	-0,058	-3,25476	2,207092	-7,80611	0,00515551
1×10^{-7}	0,3240001	-0,058	-3,273692	2,472511	-8,941682	0,00518552
Ref.	0,327	-0,0579	-3,164198	0,4507755	-1,20958	0,004926656

O leitor pode devidamente indagar sobre o amplo espectro de resultados que há entre os perfis considerados como referência para o exemplo apresentado na Tabela 12, contudo não houve de fato uma proximidade nula para a segunda derivada. Os resultados são apresentados na íntegra para $\Delta A = 1 \times 10^{-5}$ no Apêndice D.

Um segundo procedimento foi realizado para averiguar a possibilidade da derivada segunda nula na superfície através da integração numérica da equação (58) iniciando em $z^*=0$. Para essa integração foi considerado como parâmetros de entrada k , A e $n'(0)$ (vide Figura 10b). O valor de $n'(0)$ foi considerado no entorno de -3, em observação aos resultados experimentais de Janzen (2006). Foram considerados válidos os perfis em que $n(1)=0\pm 1\%$. A integração numérica foi programada na linguagem compilada C++ com algoritmo semelhante, salvo modificações específicas a esse caso, ao empregado nos trabalhos já anteriormente desenvolvidos. As demais condições para esse teste foram:

- $0,001 \leq k \leq 0,005$, $\Delta k = 1 \times 10^{-3}$;
- $0,01 \leq A \leq 1,00$, $\Delta A = 1 \times 10^{-2}$;
- $-5 \leq n'(0) \leq -1$, $\Delta n'(0) = 1 \times 10^{-1}$;
- $n''(0) = 0$;
- $n'''(0) = k(2A-1)n'(0)$;
- $n(1) = 0 \pm 1\%$;
- $\Delta z^* = 1 \times 10^{-4}$.

Os perfis válidos obtidos nessa integração numérica são apresentados na Tabela 13.

Tabela 13 – Perfis válidos para integração numérica iniciando em $z^*=0$. $\Delta k = 1 \times 10^{-3}$, $\Delta A = 1 \times 10^{-2}$, $\Delta n'(0) = 1 \times 10^{-1}$ e $\Delta z^* = 1 \times 10^{-4}$

k	A	$n'(0)$	$n(1)$	$n'(1)$	$n''(1)$	$n'''(1)$
0,001	0,22	-1,9	-0,009110733	-0,002765995	0,03783707	-0,5031199
0,001	0,22	-2	0,001888967	-0,001183712	0,01780395	-0,2526648
0,001	0,22	-2,2	-0,000720198	-0,000283654	0,005420366	-0,08444152
0,001	0,24	-2,2	-0,006693738	-0,000851826	0,01278852	-0,1767783
0,002	0,23	-2	0,003750195	-0,00165743	0,02423992	-0,3252061
0,003	0,23	-1,9	-0,003158142	-0,003460642	0,04675986	-0,5902283
0,004	0,23	-1,7	0,003418358	-0,01132555	0,1323014	-1,49076
0,005	0,24	-1,2	0,001201898	-0,2843582	1,650933	-7,074445
0,005	0,25	-1,5	0,004478557	-0,05536343	0,4859358	-4,087652

O resultado realçado na Tabela 13 é aquele que apresenta a derivada segunda em $z^*=1$ na ordem de grandeza dos valores de k , embora diferente do valor esperado. É importante observar que para diferentes valores de k os valores de A ficaram em torno de $\approx 0,23$.

Vários testes foram realizados para o perfil destacado na Tabela 13 refinando os parâmetros envolvidos com o intuito de se obter um valor para a segunda derivada mais próximo do valor de k . O melhor perfil encontrado foi: $k=0,001$, $A=0,218$ e $n'(0)=-2,29993$ obtendo $n''(1) \approx 0,002364$ com $\Delta z^* = 1 \times 10^{-4}$. Portanto, não há adequação do perfil as condições de

contorno em $z^*=1$, $n''(1)$ é diferente de k embora da ordem de grandeza deste, mas, o perfil encontra-se próximo das condições definidas para o procedimento experimental, a Figura 45 ilustra os perfis de n, n', n'' e n''' para este resultado.

Nota-se, pela Figura 45, que de fato a derivada primeira mantém um valor constante, ou seja, um trecho de reta junto à superfície, o que é coincidente com a prática. Nesse caso houve também a continuidade para a derivada terceira

Quanto aos contornos definidos na Figura 10c (capítulo 3) em que se utiliza para a relação entre derivada o valor para a derivada primeira obtido da equação de segunda ordem na condição da operação prática, os resultados mantêm as mesmas condições já apresentadas. Contudo, testes numéricos com valores refinados de Δz^* (na ordem de 10^{-6} e 10^{-7}) foram também realizados. Os resultados demonstraram um decréscimo para o valor da derivada segunda devido ao acúmulo do erro de truncamento, o que leva a uma mudança de direção na evolução dos perfis. Portanto haveria um determinado valor de Δz^* para o qual se teria um valor coincidente de k e $n''(1)$, porém tal solução é inadequada por estar condicionada a uma única discretização do domínio. É possível inferir que vencidos esses problemas peculiares de simulações numéricas se possa também superar esse condicionamento.

Figura 45: Perfis de n, n', n'', n''' . $k=0,001, A=0,22, n'(0) = -2,29993$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-4}$

De acordo com o exposto, pode se concluir que o resultado obtido é único frente às condições de trabalho utilizadas. Pelo valor de k e a ordem de valor de D , pode-se chegar a seguinte relação:

$$k = \frac{KE^2}{D} = 0,001 \quad \text{ou} \quad K = \frac{0,001D}{E^2} \propto \frac{1}{E^2} \quad (86)$$

A relação é importante, pois mostra que o coeficiente de transferência de massa, K , se mantém ainda como função da turbulência para as condições do procedimento prático em análise.

6.4 Conclusões

Os trabalhos desenvolvidos neste capítulo permitem as seguintes conclusões:

- Foi utilizada uma equação de segunda ordem (integrada) para a função $n(z^*)$, essa nova equação mantém as condições de contorno conhecidas e a adicional $n'(1)=k$;
- A equação de segunda ordem para n apresenta dois novos parâmetros, o fator de calibração (constante de integração), C , e a função integral de n , $I(z^*)$, contudo seu uso é indicado devido sua maior simplicidade em relação à equação de terceira ordem;
- A equação de segunda ordem apresenta igualdade na solução dos perfis válidos encontrados na equação de terceira ordem;
- A função $\beta(z^*)$ apresenta comportamento diferente ao esperado ao final da camada limite em decorrência de se considerar o parâmetro A constante;
- A função RMS de velocidade, $\sqrt{w'^2}$, se anula na singularidade e apresenta valor negativo junto à interface. Apesar de não representar uma limitação estatística, porque o valor RMS é apenas o desvio padrão da velocidade, esta condição pode trazer limitações para as soluções numéricas desenvolvidas;
- Alguns perfis apresentam as derivadas espaciais (primeira, segunda e terceira) nulas, o que implica em ausência de fluxo na interface. Esses perfis são válidos matematicamente, mas não fisicamente;

- O contorno de extrapolação procedido da operação prática, ou seja, segunda derivada nula na superfície com primeira derivada não nula, não é possível de ser estabelecido para gerar resultados válidos considerando todo o domínio físico como o domínio de cálculo. A operação prática de linearização dos perfis junto à interface não se verifica na gama dos resultados obtidos neste trabalho.

7 TRANSPORTE TURBULENTO DE CALOR SEGUNDO O MÉTODO OQA

Os trabalhos teórico-numéricos desenvolvidos para as equações de terceira e segunda ordem referentes ao transporte interfacial turbulento de massa permitiram concluir acerca da validade dos perfis escalares obtidos em comparação aos dados experimentais da literatura, apesar do ponto singular presente no domínio de cálculo devido às não-linearidades das equações obtidas. Uma extensão para o transporte escalar de calor, mantido as diretrizes gerais do método de OQAs apresentadas no capítulo 2, foi então realizada. Nesta análise foi considerada a invariabilidade temporal do perfil médio de temperatura, ou seja, a definição de turbulência estacionária foi aplicada ao perfil escalar na situação dimensional. Evidentemente também há uma invariabilidade temporal para a situação adimensional, mas as equações apresentam um menor número de parcelas do que as anteriormente apresentadas. As equações de terceira e segunda ordem obtidas para o transporte de calor são apresentadas neste capítulo considerando as equações originais de balanço térmico, bem como a possibilidade de obtenção de uma equação de primeira ordem. Apresentam-se também as discussões e conclusões acerca dessa extensão do método OQA aplicada ao transporte escalar de calor.

7.1 Equação da Advecção-Difusão para Energia Térmica em Fluxo Turbulento

A equação de conservação de energia térmica, em sua forma diferencial, é obtida através do assim denominado “balanço de energia térmica” em um elemento de fluido no qual a energia está parte em trânsito e parte sendo acumulada. Nesse caso, a energia térmica é uma propriedade associada ao fluido em escoamento (ÇENGEL E GHAJAR, 2012; SCHULZ, 2003; SISSON E PITTS, 1988). Considerando um regime permanente do fluido, com propriedades constantes, meio isotrópico, sem consumo ou geração de energia térmica e tensão de cisalhamento desprezível, a equação de conservação de energia térmica se apresenta da seguinte forma:

$$u\nabla T - \frac{k_T}{\rho c_e} (\nabla^2 T) = 0 \quad (87)$$

Na equação (85), T [K] (ou [°C]) é a temperatura, k_T [W/mK] (ou [W/m°C]) é a condutividade térmica, ρ [kg/m³] é a massa específica do meio, c_e [kJ/kg°C] é o calor específico a pressão constante e u [m/s] representa o vetor velocidade. No primeiro membro, o primeiro termo representa o fluxo líquido relacionado à advecção e o segundo termo representa o fluxo líquido relacionado à difusão molecular.

O estudo foi considerado de forma unidimensional (eixo z), sem velocidades preferenciais e considerando as propriedades de Reynolds para a derivação da equação de energia em condições turbulentas, condições para as quais a equação (87) se torna:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k_T}{\rho c_e} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} - \overline{w' \theta_T'} \right) = 0 \quad (88)$$

$\bar{T}$ é a temperatura média, w' representa a flutuação vertical de velocidade e θ_T' representa a flutuação de temperatura.

A utilização de considerações *a priori*, segundo o método de OQAs, permite a utilização da equação baseada na grandeza estatística dos momentos centrais para a flutuação de temperatura visando a solucionar o “problema de fechamento”. Essa equação adicional, nas condições empregadas de trabalho, apresenta-se da seguinte forma:

$$\overline{w' \theta_T'^{\sigma-1}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \overline{w' \theta_T'^{\sigma}}}{\partial z} = \frac{k_T}{\rho c_e} \left(\overline{\theta_T'^{\sigma-1}} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2} + \overline{\theta_T'^{\sigma-1} \frac{\partial^2 \theta_T'}{\partial z^2}} \right) \quad (89)$$

Na equação (89) σ representa a ordem do balanço de momentos centrais para a flutuação de temperatura. Foram realizados procedimentos semelhantes aos utilizados no caso de transferência de massa (ver equações (56) e (57) para o caso não estacionário) para a obtenção de uma única equação para a representação do perfil normalizado da temperatura média, ou seja, foi considerada ordem de balanço $\sigma=2$ na equação (89) e função de redução para as flutuações de temperatura, α_T , constante. A equação (89) para $\sigma=2$ é:

$$\overline{w' \theta_T'} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{w' \theta_T'^2}}{\partial z} = \frac{k_T}{\rho c_e} \left(\overline{\theta_T'} \frac{\partial^2 \theta_T'}{\partial z^2} \right) \quad (89a)$$

Os resultados obtidos neste estudo foram comparados com dados experimentais de medida de perfil de temperaturas médias obtidas por Puits, Resagk e Thess (2013) para um escoamento convectivo turbulento confinado (escoamentos turbulentos *Rayleigh-Bérnard*). Nesse trabalho experimental os autores mantiveram o número de Prandtl, Pr , constante em cada experimento, o que faz dele um parâmetro de controle. Portanto, o número de Prandtl foi considerado também aqui, nas equações já obtidas, ajustando o coeficiente $\frac{k_T}{\rho c_e}$ conforme a relação expressa pela equação (90).

$$\frac{k_T}{\rho c_e} = \frac{1}{\rho} \frac{\mu}{Pr} = \frac{\nu}{Pr} \quad (90)$$

μ [kg/ms] é a viscosidade dinâmica do fluido e ν [m²/s] é a viscosidade cinemática do fluido. Assim sendo, o conjunto de equações obtidas que foi utilizado para a análise do transporte turbulento de calor é apresentado pelo sistema de equações (91).

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\nu}{Pr} \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial z^2} = \frac{\partial \overline{w' \theta_T'}}{\partial z} \\ \overline{w' \theta_T'} \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} + \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{w' \theta_T'^2}}{\partial z} = \frac{\nu}{Pr} \left(\overline{\theta_T' \frac{\partial^2 \theta_T'}{\partial z^2}} \right) \end{array} \right. \quad (91)$$

7.2 Equações de Conservação de Energia Térmica expressas em Parâmetros do Método OQA

As definições paramétricas encontradas para as relações estatísticas do transporte de massa (no capítulo 2) são estendidas para o caso do transporte de calor. Abaixo se apresenta, a título de exemplificação, as equações: (92), a qual representa a obtenção da temperatura média segundo utilização da função de partição das oscilações de temperatura, n_T ; (93), que representa a média da flutuação de temperatura elevada à ordem σ qualquer através da função de partição e função coeficiente de redução, α_T ; (94), a média do fluxo turbulento de temperatura, na qual a temperatura encontra-se elevada a uma ordem σ qualquer, utilizando as funções de partição, coeficiente de redução, coeficiente de superposição, β_T , RMS de

velocidade, $\sqrt{w'^2}$; e, por último, a equação (95) que expressa a média do produto de flutuação e derivada espacial da flutuação de temperatura utilizando as funções de partição e coeficiente de redução.

$$\bar{T} = n_T T_S + (1 - n_T) T_\infty \quad (92)$$

$$\begin{aligned} \overline{\theta_T'^\sigma} &= \theta_T'^\sigma n_T + \theta_T'^\sigma (1 - n_T) \\ &= n_T (1 - n_T) [(1 - n_T)^{\sigma-1} + (-1)^\sigma n_T^{\sigma-1}] (T_S - T_\infty)^\sigma (1 - \alpha_T)^\sigma \end{aligned} \quad (93)$$

$$\begin{aligned} \overline{w' \theta_T'^\sigma} &= n_T (1 - n_T) (1 - \alpha_T)^\sigma (T_S - T_\infty)^\sigma \sqrt{w'^2} \\ &\left\{ \sqrt{\frac{\beta_T + n_T - 2\beta_T n_T}{1 - (\beta_T + n_T - 2\beta_T n_T)}} [(1 - n_T)^{\sigma-1} \beta_T + (-1)^\sigma (n_T)^{\sigma-1} (1 - \beta_T)] \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{1 - (\beta_T + n_T - 2\beta_T n_T)}{\beta_T + n_T - 2\beta_T n_T}} [(1 - n_T)^{\sigma-1} (1 - \beta_T) + (-1)^\sigma (n_T)^{\sigma-1} \beta_T] \right\} \end{aligned} \quad (94)$$

$$\begin{aligned} \overline{\theta_T'^\sigma \frac{\partial^2 \theta_T'}{\partial z^2}} &= \left\{ (1 - n_T)^{\sigma-1} \frac{\partial^2 [(1 - n_T)(1 - \alpha_T)]}{\partial z^2} + (-n_T)^{\sigma-1} \frac{\partial^2 [-n_T(1 - \alpha_T)]}{\partial z^2} \right\} \\ &\quad n_T (1 - n_T) (1 - \alpha_T)^\sigma (T_S - T_\infty)^{\sigma+1} \end{aligned} \quad (95)$$

As equações do sistema de equação (91) podem ser escritas segundo parâmetros do método OQA utilizando os conceitos das equações (92) a (95), como apresentado a seguir. As funções básicas β_T e $\sqrt{w'^2}$ foram agrupadas no parâmetro IJ_T . Foi considerado $\sigma=2$ e função coeficiente de redução constante, $A_T=(1-\alpha_T)$. As equações foram expressas de forma adimensional, considerando $z^*=z/E$, com $E=z_2-z_1$.

$$IJ_T^* = \frac{n_T (1 - n_T) A_T E \sqrt{w'^2}}{v \sqrt{n_T (1 - n_T) + \frac{\beta_T (1 - \beta_T)}{(2\beta_T - 1)^2}}} \quad (96)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{Pr} \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} &= \frac{\partial IJ_T^*}{\partial z^*} \\ IJ_T^* \frac{\partial n_T}{\partial z^*} + \frac{A_T}{2} \frac{\partial [IJ_T^* (1 - 2n_T)]}{\partial z^*} &= -\frac{2}{Pr} n_T (1 - n_T) A_T^2 \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} \end{aligned} \right\} \quad (97)$$

A obtenção de uma única equação para a função n_T é possível através de substituição entre as equações do sistema de equações (97) por meio de relações para o termo IJ_T^* . Foram obtidas as equações de terceira e segunda ordem (integrada), equação (98) e (99) a seguir, respectivamente:

$$\begin{aligned} &\left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right] \frac{\partial^3 n_T}{\partial z^{*3}} \frac{\partial n_T}{\partial z^*} + \left\{ - \left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right] \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\{1 + 2A_T [A_T (1 - 2n_T) - 1]\}}{A_T} \left(\frac{\partial n_T}{\partial z^*} \right)^2 \right\} \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} = 0 \end{aligned} \quad (98)$$

$$A_T \left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right] \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} + (1 - A_T) \left(\frac{\partial n_T}{\partial z^*} + Pr C_T \right) \frac{\partial n_T}{\partial z^*} = 0 \quad (99)$$

Na equação (99) C_T é uma constante de integração, considerada aqui como um fator de calibração. É importante observar que a equação (98) não possui o número de Prandtl envolvido. Realizando uma comparação entre a equação (98) com a equação (58), para o transporte de massa, infere-se que a não-estacionariedade do perfil escalar leva ao acréscimo de termos nas equações com o envolvimento do parâmetro adimensional k . Segue-se que a não-estacionariedade do perfil médio de energia térmica acrescentaria novos termos envolvendo o número de Prandtl à equação (98). Portanto, quando considerada turbulência estacionária aos perfis escalares, as equações de terceira ordem resultantes envolvem tão somente os parâmetros estatísticos estabelecidos no método OQA. Isso permite inferir que a equação de terceira ordem obtida para o transporte normalizado de um escalar em condição estacionária aponta para sua dependência unicamente com o grau de agitação do meio, o qual é representado pela função coeficiente de redução assumida aqui constante. Há, portanto uma considerável simplificação que deve ainda ser melhor avaliada. Ela pode acarretar limitações quanto a gama de aplicações práticas envolvidas, como é o caso de transferência de calor em gases, onde as propriedades do fluido são reconhecidamente importantes. Entretanto, como se trata de uma metodologia em teste, essas possíveis vantagens devem ser ressaltadas. Similarmente para a comparação entre as equações de segunda ordem, térmica e mássica,

quando se considera a não-estacionariedade os termos correspondentes às constantes de integração (portanto a serem estabelecidos por condições de contorno) são multiplicados por relações envolvendo k ou Pr acrescido de termos envolvendo as funções básicas definidas no método OQA. Esta dupla condição mostra que, em se possuindo condições de contorno realistas também aqui a solução prescinde de Pr ou k .

Para o caso extremo em que $A_T=0$, ou seja, no caso em que haveria somente a condução pura envolvida no processo de transferência de energia térmica, a equação (98) se torna:

$$\left(\frac{\partial n_T}{\partial z^*}\right)^2 \frac{\partial^2 n_T}{\partial z^{*2}} = 0 \quad (100)$$

As possíveis soluções para a equação (100) seriam uma função constante ou uma função linear, a depender das condições de contorno. Portanto percebe-se que o caso extremo não é bem representado. As mesmas soluções ocorrem similarmente para a equação (99) com $A_T=0$. A partir da equação (99) é possível a obtenção de uma equação de primeira ordem considerando o sistema abaixo:

$$\begin{cases} \frac{\partial n_T}{\partial z^*} = y \\ A_T \left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right] \frac{\partial y}{\partial z^*} = (A_T - 1)(y + Pr C_T)y \end{cases} \quad (101)$$

Realizando a divisão entre as equações do sistema de equações (101) e integrando obtém-se:

$$\frac{dn_T}{dz^*} = -Pr C_T + \Omega \exp \left\{ \frac{2(1 - A_T)}{A_T \sqrt{4A_T^2 + 1}} \tanh^{-1} \left[\frac{A_T(2 - 4n) - 1}{\sqrt{4A_T^2 + 1}} \right] \right\} \quad (102)$$

Na equação (102) Ω é uma constante advinda da segunda integração realizada.

As equações (98), (99) e (102) apresentam um ponto de singularidade no domínio de cálculo idêntico à expressa pela equação (64) analisada nas equações para o transporte de massa.

7.3 Condições de Contorno para o Transporte Turbulento de Calor

Como referido anteriormente, os resultados obtidos no estudo do transporte de calor foram comparados com os dados experimentais da literatura dos autores Puits, Resagk e Thess (2013). As medidas experimentais desses autores consistiram na obtenção do perfil médio de temperaturas nas camadas limites térmicas de um escoamento confinado entre duas placas horizontais, sendo a placa inferior mantida aquecida e a placa superior resfriada, com as paredes laterais adiabáticas. Nessa situação há o desenvolvimento de correntes de convecção no espaço fechado, uma vez que o fluido mais pesado estará em cima do mais leve e, por conseguinte, haverá a ascendência do fluido mais leve empurrando o mais pesado para baixo. Formam-se assim correntes de convecção natural na forma de células hexagonais conhecidas como *células de Bénard*. A evolução para o estado turbulento ocorre quando essas células se quebram, em geral para o *número de Rayleigh* $Ra > 3 \times 10^5$ (ÇENGEL E GHAJAR, 2012). O número de Rayleigh é definido como o produto entre o *número de Grashof*, que descreve a relação entre fluabilidade e viscosidade, e o número de Prandtl. Puits, Resagk e Thess (2013) apresentaram os perfis normalizados de temperaturas médias, $\bar{\theta}$, conforme equações (103) e (103a) para a placa aquecida e para a placa resfriada, respectivamente.

$$\bar{\theta}_{aquecida} = \frac{2(T_{aquecida} - \bar{T}_z)}{T_{aquecida} - T_{resfriada}} \quad (103)$$

$$\bar{\theta}_{resfriada} = \frac{2(\bar{T}_z - T_{resfriada})}{T_{aquecida} - T_{resfriada}} \quad (103a)$$

Portanto, por analogia:

$$\bar{\theta}_{aquecida} = 2(1 - n_T) \quad (104)$$

$$\bar{\theta}_{resfriada} = 2n_T \quad (104a)$$

Admitindo que todo o domínio de cálculo possa representar todo o domínio físico, as condições de contorno conhecidas são:

- $n_T = 1$, $\bar{\theta}_{aquecida} = 0$, em $z^*=0$ (placa aquecida). Analogamente, $\bar{\theta}_{resfriada} = 2$;
- $n_T = 0$, $\bar{\theta}_{aquecida} = 2$, em $z^*=1$ (placa resfriada). Analogamente, $\bar{\theta}_{resfriada} = 0$;

- $n_T = 0,5$, $\bar{\theta}_{aquecida} = \bar{\theta}_{resfriada} = 1$, em z_m^* (referente a posição onde ocorre a média das temperaturas das placas).

Espera-se uma auto-similaridade (um perfil antissimétrico) na região de variação da temperatura, $z_m^*=0,5$. Portanto, quando $n_T(z_m^*) = 0,5$ tem-se que $n_T'(z_m^*)=0$. Tal condição leva ao seguinte contorno interno para a equação (99):

$$(1 - A_T) \left(\frac{\partial n_T}{\partial z^*} \Big|_{0,5} + PrC_T \right) \frac{\partial n_T}{\partial z^*} \Big|_{0,5} = 0 \quad (105)$$

Assim, ou $n_T'(0,5)=0$ ou $n_T'(0,5) = -PrC_T$.

Foi considerado inicialmente o uso da equação de segunda ordem para realização dos cálculos. Os testes iniciais demonstraram a impossibilidade de se utilizar a condição $n_T'(0,5) = -PrC_T$ para a obtenção de perfis válidos em comparação aos perfis da literatura. A utilização do contorno $n_T'(0,5)=0$ leva a equação (99) a se comportar nesse ponto como um “ponto de equilíbrio” onde as integrações numéricas tendem à funções lineares ou constantes nesse ponto e assim se mantêm. Pelos resultados iniciais observou-se que o domínio de cálculo não poderia contemplar todo o domínio físico. Nos testes numéricos realizados posteriormente com as equações de terceira e primeira ordem constatou-se também a não possibilidade de se obter perfis antissimétricos em decorrência da singularidade presente no domínio de cálculo.

Diferentes possibilidades de domínios de cálculo para as integrações numéricas foram realizadas através de análises globais de tendência das equações obtidas. Entre as possibilidades analisadas a equação (102) acrescentou ainda restrições para a relação n_T e A_T devido à restrição do argumento do arco tangente hiperbólico:

$$-1 \leq \frac{A_T(4n_T - 2) + 1}{\sqrt{4A_T^2 + 1}} \leq 1 \quad (106)$$

Como n_T e A_T são positivos tem-se como condição:

$$n_T \leq \frac{2A_T - 1 + \sqrt{4A_T^2 + 1}}{4A_T} \quad (106a)$$

É importante notar que o segundo membro da equação (106a) representa o ponto singular presente no domínio de cálculo. A restrição para A_T (no argumento do arco tangente hiperbólico) é ilustrado na Figura 46.

Figura 46: Restrição entre n_T e A_T no arco tangente hiperbólico

Contudo, observou-se nos cálculos desenvolvidos que há um crescimento negativo, não linear, da primeira derivada com o crescimento positivo de n_T , o que é fisicamente esperado em regiões junto à interface. Entretanto, as situações abordadas mostraram uma concavidade não esperada para a curva de n_T . O crescimento negativo mencionado avaliza a situação de uma variação da derivada segunda apesar da nulidade ou constância da mesma expressa pela equação (99). Assim, determinou-se que o domínio de cálculo deveria se restringir para a região junto à interface, sendo as condições físicas consideradas adequadas para essa representação.

Estudos específicos, envolvendo as equações de segunda e primeira ordem, são necessários para melhor compreensão e desenvolvimento de soluções originais que representem adequadamente o transporte de calor em análise. Como esses estudos estão adiante dos objetivos dessa pesquisa, é apresentada a solução numérica para a equação de terceira ordem, equação (98), comparada com os dados da literatura.

Note-se que esta solução numérica para a equação de terceira ordem representa um passo relevante na aplicação da metodologia, porque envolve um problema térmico (não mássico) aplicado a uma situação estacionária, situações ainda não abordadas e que necessitavam ser consideradas para viabilizar a generalização do método.

7.4 Solução Numérica da Equação (98) e Comparação com Dados Experimentais

A integração numérica da equação (98) foi realizada através do método de Runge-Kutta de quarta ordem otimizando os parâmetros envolvidos com o método de quasi-Newton, de forma semelhante aos processos utilizados nas integrações numéricas das equações (58) e (77) para o caso de transferência de massa. Os testes foram realizados utilizando a planilha de cálculo Microsoft Excel®.

Para a integração numérica da equação (98) foi considerado o seguinte sistema:

$$\begin{cases} \frac{\partial n_T}{\partial z^*} = j_T, \frac{dj_T}{dz^*} = w_T, \frac{dw_T}{dz^*} = \frac{f_{1T}}{f_{2T}}, \text{ onde} \\ f_{1T} = \left\{ \left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right] w_T - \frac{\{1 + 2A_T [A_T (1 - 2n_T) - 1]\}}{A_T} (j_T)^2 \right\} w_T, \\ f_{2T} = \left[2A_T n_T (1 - n_T) + \frac{(1 - 2n_T)}{2} \right]. \end{cases} \quad (107)$$

Os parâmetros de entrada utilizados para o início da integração numérica são A_T , $j_T(0)$ e $w_T(0)$. Utilizar a primeira derivada como parâmetro de entrada por tentativa e erro não é desejável, mas enquanto estudos e desenvolvimentos novos se fazem necessários essa situação é adequada para avaliação dos resultados obtidos.

A Figura 47 apresenta o perfil obtido para $A_T=0,41$, $j_T(0)=-101$, $w_T(0)=2800$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-3}$ para a região junto à interface da placa aquecida. É apresentada também na Figura 47 a comparação com os dados experimentais de Puits, Resagk e Thess (2013) com três diferentes números de Rayleigh. Observa-se que há comportamento similar entre os perfis mensurados e o perfil calculado.

Entende-se que as previsões apresentadas para o caso térmico ainda necessitam de aprimoramentos, mas frisa-se que o mesmo ocorreu no estudo do caso mássico, para o qual Schulz et al (2011b) apresentaram inicialmente uma solução com desvios aparentes e posteriormente Schulz et al (2011a) apresentaram soluções coincidentes com dados medidos.

Figura 47: Perfis mensurados de $\bar{\theta}_{aquecida}$ com diferentes números de Rayleigh e perfil calculado de $\bar{\theta}_{aquecida}$ com $A_T=0,41$, $j_T(0)=-101$, $w_T(0)=2800$ e $\Delta z^*=1 \times 10^{-3}$

7.5 Conclusões

As conclusões acerca dos resultados obtidos na extensão do método de OQA aplicado ao transporte de calor em condição estacionária, nas equações de diferentes ordens obtidas e na solução numérica da equação (98) podem ser assim resumidamente apresentadas:

- O método OQA se aplica a qualquer fenômeno de transporte com condições oscilatórias permitindo a obtenção de funções pré-definidas que parametrizam o processo, como observado para o caso de transferência interfacial de massa e calor;
- A definição de estacionariedade do perfil escalar resulta em uma equação diferencial não linear de terceira ordem que não expressa relação direta com parâmetros intrínsecos do meio fluido, como foi o caso do número de Prandtl, mas é garantida uma relação com o grau de agitação do meio através dos parâmetros definidos do método OQA;
- A equação de segunda ordem obtida apresenta o envolvimento do número de Prandtl na constante de integração, o que mostra que havendo condições de contorno adequadas ela pode ser quantificada sem haver a necessidade explícita do número de Prandtl;

- É possível a obtenção de uma equação de primeira ordem, porém a mesma apresenta limitações para a relação entre n_T e A_T resultante do argumento do arco tangente hiperbólico;
- As três equações obtidas para o caso térmico estacionário (terceira, segunda e primeira ordem) apresentam o mesmo ponto de singularidade no domínio de cálculo em relação às equações desenvolvidas para a transferência de massa em condições não-estacionárias. Infere-se que a singularidade é uma característica intrínseca no método de OQA, pelo menos no que tange ao caso de A constante;
- As equações obtidas possuem desenvolvimentos diferentes em relação aos ensaios numéricos, sugerindo que existem diferentes regiões de aplicação entre elas, o que exige estudos e desenvolvimentos específicos adicionais;
- O domínio de cálculo, no caso considerado, não pode representar todo o domínio físico em estudo, porém as equações obtidas podem ser utilizadas para representação do perfil nas regiões da camada limite junto às interfaces, o que é caracteristicamente adequado à metodologia de ondas quadradas aleatórias;
- A integração numérica da equação de terceira ordem fornece perfis normalizados de temperatura que seguem comportamento similar aos dos dados experimentais.

8 Conclusões Gerais e Recomendações para Trabalhos Futuros

8.1 Conclusões Gerais

O objetivo deste trabalho foi inferir características e/ou limitações do método OQA de maneira geral para transferência de escalares e de forma particular quando aplicado a: 1) um caso de transferência interfacial unidimensional de massa em meio turbulento em uma situação idealizada em que a função de redução das flutuações de escalar, α , é considerada constante e 2) um caso de transferência interfacial unidimensional de calor com condições semelhantes para α . Esse objetivo foi alcançado em se realizando simulações numéricas para as equações não lineares de terceira e segunda ordem obtidas através das funções básicas definidas pela metodologia de OQAs. No caso do transporte mássico as soluções numéricas forneceram soluções viáveis para o perfil normalizado de concentração n , permitindo avaliar a abrangência e sensibilidade do modelo em relação aos parâmetros envolvidos. A definição do contorno adicional, com base física, $n''(1)=k$, aliado aos contornos usuais $n(1)=0$ e $n'(1)=0$, foi um fator preponderante para uma análise objetiva da função n . Os resultados encontrados apresentam-se adequados para toda uma região de variação entre a concentração superior e a concentração do seio fluido. O ponto de singularidade, presente no domínio de cálculo, foi avaliado através de testes mais refinados e com integrações numéricas pela esquerda e direita no entorno da singularidade, possibilitando as seguintes conclusões: o comportamento geral do perfil de n não é dependente do comportamento de suas derivadas de alta ordem (ou seja, baixo grau de interferência das derivadas de ordem superior, sendo esta uma importante conclusão dentre as mais relevantes), porém variações dos parâmetros adimensionais A e k ocasionam variações no perfil de n ; os parâmetros A e k afetam fortemente o comportamento da segunda e terceira derivadas não afetando a expectativa de comportamento de n , o qual se mostra contínuo e suave; a integral da segunda derivada de n pode ser compreendida como um caso de integral imprópria convergente uma vez que a função da primeira derivada apresenta-se contínua; a função $\alpha(z^*)$ é dependente do grau de agitação turbulenta, isto se reflete através da variação do valor médio A presente nos resultados. Assim, a análise de comportamento da função n e de suas derivadas no entorno do ponto de descontinuidade

validaram as previsões obtidas na integração numérica e permitiram compreender a influência das derivadas de ordem superior em relação às mesmas. As previsões obtidas com a integração numérica seguem o comportamento das medidas experimentais para a camada limite de transferência.

Quanto à análise de sensibilidade do modelo, o conjunto das trinas ordenadas A , k e $n'''(1)$ reproduzem uma superfície tridimensional definida com relações observáveis entre os parâmetros envolvidos. A equação (58) apresenta um padrão de comportamento “multiplicativo”. Valores para os parâmetros $\sim 0,27 < A < 0,6$ com $0,001 < k < 0,005$ apresentam melhor definição nas relações entre os mesmos e $n'''(1)$, os perfis obtidos nessas condições apresentam valores para $n'(0)$ entre $-12,5$ e ~ 0 . Em geral, valores crescentes do parâmetro k levam a valores decrescentes de $n'''(1)$, valores crescentes de A levam a valores crescentes de $n'''(1)$ e valores crescentes de A levam a valores decrescentes de $n'(0)$. Quanto às limitações decorrentes do parâmetro A ser considerado constante tem-se que a função $\beta(z^*)$ não apresentou o comportamento esperado ao final da camada limite de transferência e que o perfil de $IJ^*(z^*)$ apresentou valor nulo na singularidade, indicando um RMS de velocidade nulo, a função $IJ^*(z^*)$ apresentou também valores negativos junto à interface, o que deve ser ainda melhor avaliado. Esta última condição pode inserir limitações quanto ao escopo das soluções obtidas.

Foi possível a obtenção de perfis com supressão da descontinuidade para a terceira derivada, nestes a função $n'(z^*)$ apresenta-se de forma contínua e sua suavidade está relacionada à função $(f_1 + f_2)(z^*)$, a qual assume valor zero no ponto de singularidade. As funções $n''(z^*)$ e $n'''(z^*)$ apresentam-se neste caso, também, contínuas e suaves. No entanto estes perfis mostraram-se mais afastados aos dados experimentais, seguindo, contudo, o comportamento esperado de n .

Na gama dos resultados obtidos, a consideração da operação prática de linearização junto à interface, ou seja, segunda derivada nula na superfície com primeira derivada não nula, mostrou-se inadequada. Compreende-se assim que o contorno de extrapolação linear não levou a resultados observáveis que poderiam justificar o procedimento experimental. Esse é um ponto positivo, pois demonstra que a equação (58) se adequa a contornos físicos tradicionais. Ainda em relação aos resultados obtidos, alguns perfis apresentam derivadas nulas junto à interface demonstrando que não há fluxo na mesma, tais resultados são adequados matematicamente, mas fisicamente inviáveis.

Na extensão para o caso de transporte térmico, a integração numérica da equação de terceira ordem forneceu perfis normalizados de temperatura que seguem o comportamento dos dados

experimentais da literatura. Contudo, as equações obtidas (primeira, segunda e terceira ordem) demonstraram a impossibilidade de se considerar todo o domínio físico como domínio de cálculo. A equação de primeira ordem apresentou limitações para a relação entre n_T e A_T devido ao argumento do arco tangente hiperbólico presente na mesma.

Todas as equações obtidas no presente trabalho (tanto com condição estacionária quanto não estacionária aplicada ao escalar) apresentaram o mesmo ponto de singularidade no domínio de cálculo. Infere-se que a singularidade é uma característica intrínseca ao método de OQA.

Como conclusão geral, o método OQA se mostrou adequado para a geração de equações que representam a evolução de perfis escalares nas regiões da camada limite junto às interfaces para a transferência unidimensional turbulenta.

8.2 Recomendações para Trabalhos Futuros

Com base nas análises e nos resultados discutidos nesta dissertação, apresentam-se aqui algumas recomendações para futuros trabalhos na área. Para o caso de transferência de massa, deve-se ainda realizar novas análises numéricas para a equação de segunda ordem objetivando a busca por possíveis novas características do comportamento da função n . Estudos matemáticos mais específicos para a análise do ponto de singularidade nas equações, como a convergência de integrais em pontos descontínuos, são desejáveis. Para o caso de transferência de calor, estudos envolvendo todas as ordens de equações obtidas são necessários para uma melhor compreensão dos diferentes desenvolvimentos da função n_T , e também, para a compreensão das diferentes regiões que venham a se estabelecer no domínio de cálculo. A obtenção de possíveis soluções originais é encorajada. Sugerem-se, também, esforços direcionados para a resolução numérica de equações obtidas pela metodologia de OQAs onde a função α se apresente variável, para o levantamento das dificuldades para a calibração dos parâmetros A e k em situações mais reais (fora dos tanques de grades oscilantes) e, também, para os estudos com as equações de terceira ou segunda ordem aplicados a corpos de águas naturais.

APÊNDICE A – Equação de Conservação de Massa baseada no Momento Central

Equação de conservação de um composto, sem geração ou consumo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_x \frac{\partial C}{\partial x} + V_y \frac{\partial C}{\partial y} + V_z \frac{\partial C}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (I)$$

Aplicando a decomposição de Reynolds ($F = \bar{f} + f'$) na equação (I):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + \bar{v}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v}_x \frac{\partial c'}{\partial x} + v'_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + v'_x \frac{\partial c'}{\partial x} + \bar{v}_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{v}_y \frac{\partial c'}{\partial y} + v'_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + v'_y \frac{\partial c'}{\partial y} + \bar{v}_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \\ + \bar{v}_z \frac{\partial c'}{\partial z} + v'_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + v'_z \frac{\partial c'}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c'}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (II)$$

Multiplicando a equação (II) por c'^θ :

$$\begin{aligned} c'^\theta \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{1}{\theta+1} \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial t} + c'^\theta \bar{v}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \frac{1}{\theta+1} \bar{v}_x \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial x} + v'_x c'^\theta \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \frac{1}{\theta+1} v'_x \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial x} \\ + c'^\theta \bar{v}_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \frac{1}{\theta+1} \bar{v}_y \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial y} + v'_y c'^\theta \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \frac{1}{\theta+1} v'_y \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial y} + c'^\theta \bar{v}_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \\ + \frac{1}{\theta+1} \bar{v}_z \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial z} + v'_z c'^\theta \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{1}{\theta+1} v'_z \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial z} \\ = D \left(c'^\theta \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2} + c'^\theta \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial y^2} + c'^\theta \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (III)$$

Aplicando o operador de média e suas propriedades na equação (III):

$$\begin{aligned} \bar{c}^\theta \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{1}{\theta+1} \frac{\partial \bar{c}^{\theta+1}}{\partial t} + \bar{c}^\theta \bar{v}_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \frac{1}{\theta+1} \bar{v}_x \frac{\partial \bar{c}^{\theta+1}}{\partial x} + \overline{v'_x c'^\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \frac{1}{\theta+1} \overline{v'_x c'^{\theta+1}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \\ + \bar{c}^\theta \bar{v}_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \frac{1}{\theta+1} \bar{v}_y \frac{\partial \bar{c}^{\theta+1}}{\partial y} + \overline{v'_y c'^\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \frac{1}{\theta+1} \overline{v'_y c'^{\theta+1}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{c}^\theta \bar{v}_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \\ + \frac{1}{\theta+1} \bar{v}_z \frac{\partial \bar{c}^{\theta+1}}{\partial z} + \overline{v'_z c'^\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{1}{\theta+1} \overline{v'_z c'^{\theta+1}} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \\ = D \left(\bar{c}^\theta \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \overline{c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2}} + \bar{c}^\theta \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \overline{c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial y^2}} + \bar{c}^\theta \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} + \overline{c'^\theta \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2}} \right) \end{aligned} \quad (IV)$$

Organizando a equação (IV):

$$\begin{aligned}
& \overline{c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{1}{\theta + 1} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial t} + \overline{c'^\theta} \left(\overline{v_x} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \\
& + \frac{1}{\theta + 1} \left(\overline{v_x} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial z} \right) + \overline{v'_x c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \overline{v'_y c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \\
& + \overline{v'_z c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{1}{\theta + 1} \left(\overline{v'_x} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \overline{v'_y} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \overline{v'_z} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial z} \right) \\
& = D \left(\overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}'}{\partial x^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}'}{\partial y^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}'}{\partial z^2} \right) \quad (V)
\end{aligned}$$

Trabalhando as parcelas $\overline{v'_x \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial x}} + \overline{v'_y \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial y}} + \overline{v'_z \frac{\partial c'^{\theta+1}}{\partial z}}$ da equação (V):

a) Regra do produto do Cálculo Diferencial

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \overline{v'_x c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z c'^{\theta+1}}}{\partial z} \\
& = \overline{v'_x} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \overline{v'_y} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \overline{v'_z} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial z} + \overline{c'^{\theta+1}} \left(\frac{\partial v'_x}{\partial x} + \frac{\partial v'_y}{\partial y} + \frac{\partial v'_z}{\partial z} \right) \quad (VI)
\end{aligned}$$

b) Logo

$$\begin{aligned}
& \overline{v'_x} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \overline{v'_y} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \overline{v'_z} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial z} \\
& = \frac{\partial \overline{v'_x c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z c'^{\theta+1}}}{\partial z} - \overline{c'^{\theta+1}} \left(\frac{\partial v'_x}{\partial x} + \frac{\partial v'_y}{\partial y} + \frac{\partial v'_z}{\partial z} \right) \quad (VIa)
\end{aligned}$$

c) Utilizando a equação da continuidade, $\frac{\partial v'_x}{\partial x} + \frac{\partial v'_y}{\partial y} + \frac{\partial v'_z}{\partial z} = 0$, tem-se:

$$\overline{v'_x} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \overline{v'_y} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \overline{v'_z} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial z} = \frac{\partial \overline{v'_x c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'_y c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v'_z c'^{\theta+1}}}{\partial z} \quad (VIb)$$

Utilizando a equação (VIb) na equação (V):

$$\begin{aligned}
& \overline{c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{1}{\theta + 1} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial t} + \overline{c'^\theta} \left(\overline{v_x} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \\
& + \frac{1}{\theta + 1} \left(\overline{v_x} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial x} + \overline{v_y} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial y} + \overline{v_z} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial z} \right) + \overline{v'_x c'^\theta} \frac{\partial c}{\partial x} + \overline{v'_y c'^\theta} \frac{\partial c}{\partial y} \\
& + \overline{v'_z c'^\theta} \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{1}{\theta + 1} \left(\overline{\partial v'_x c'^{\theta+1}} + \overline{\partial v'_y c'^{\theta+1}} + \overline{\partial v'_z c'^{\theta+1}} \right) \\
& = D \left(\overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 c'}{\partial y^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right) \quad (\text{VII})
\end{aligned}$$

Considerando unidimensional (eixo z) e ausência de velocidade preferencial, a equação (VII) se torna:

$$\overline{c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{1}{\theta + 1} \frac{\partial \overline{c'^{\theta+1}}}{\partial t} + \overline{v'_z c'^\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{1}{\theta + 1} \left(\overline{\partial v'_z c'^{\theta+1}} \right) = D \left(\overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \overline{c'^\theta} \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right) \quad (\text{VIII})$$

Considerando $v'_z = w'$ e organizando a equação (VIII):

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial \overline{c'^\theta}}{\partial t} + \frac{\overline{c'^{\theta-1}}}{c'^{\theta-1}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\overline{w' c'^{\theta-1}}}{w' c'^{\theta-1}} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{1}{\theta} \frac{\partial \overline{w' c'^\theta}}{\partial z} = D \left(\overline{c'^{\theta-1}} \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \overline{c'^{\theta-1}} \frac{\partial^2 c'}{\partial z^2} \right) \quad (\text{IX})$$

A equação (IX) é a equação (28) apresentada na subseção 2.8.2 do capítulo 2.

APÊNDICE B – Tabelas Resumo para aplicação do Método Runge-Kutta no programa Microsoft Excel®

A) Dados de entrada

Condições Iniciais			
$n(I)$	$j(I)$	$w(I)$	$dw/dz^* (I)$
0	0	k	$dw/dz^* (I)$

Valores fixos			
k	A	α	Δz^*
k	A	$(I-A)$	Δz^*

B) Tabelas gerais

Ite	z^*	n_i	$n_{i-1/2}^a$	$n_{i-1/2}^b$	n_{i-1}
i	z_i^*	n_i	$n_i - (\Delta z^*/2) j_i$	$n_i - (\Delta z^*/2) j_{i-1/2}^a$	$n_i - \Delta z^* j_{i-1/2}^b$
i-1	$z_{i-1}^* = z_i^* - \Delta z^*$	$n_{i-1} = n_i - (\Delta z^*/6)(k_{11} + 2k_{12} + 2k_{13} + k_{14})$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Ite	z^*	$j_i = k_{11}$	$j_{i-1/2}^a = k_{12}$	$j_{i-1/2}^b = k_{13}$	$j_{i-1} = k_{14}$
i	z_i^*	j_i	$j_i - (\Delta z^*/2) w_i$	$j_i - (\Delta z^*/2) w_{i-1/2}^a$	$j_i - \Delta z^* w_{i-1/2}^b$
i-1	z_{i-1}^*	$j_{i-1} = j_i - (\Delta z^*/6)(k_{21} + 2k_{22} + 2k_{23} + k_{24})$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Ite	z^*	$w_i = k_{21}$	$w_{i-1/2}^a = k_{22}$	$w_{i-1/2}^b = k_{23}$	$w_{i-1} = k_{24}$
i	z_i^*	w_i	$w_i - (\Delta z^*/2) (dw/dz^*)_i$	$w_i - (\Delta z^*/2) (dw/dz^*)_{i-1/2}^a$	$w_i - \Delta z^* (dw/dz^*)_{i-1/2}^b$
i-1	z_{i-1}^*	$w_{i-1} = w_i - (\Delta z^*/6)(k_{31} + 2k_{32} + 2k_{33} + k_{34})$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Ite	z^*	$(dw/dz^*)_i = k_{31}$	$(dw/dz^*)_{i-1/2}^a = k_{32}$	$(dw/dz^*)_{i-1/2}^b = k_{33}$	$(dw/dz^*)_{i-1} = k_{34}$
i	z_i^*	$(dw/dz^*)_i$	$(f_{1i-1/2}^a + f_{2i-1/2}^a)/f_{3i-1/2}^a$	$(f_{1i-1/2}^b + f_{2i-1/2}^b)/f_{3i-1/2}^b$	$(f_{1i-1} + f_{2i-1})/f_{3i-1}$
i-1	z_{i-1}^*	$(dw/dz^*)_{i-1} = (f_{1i} + f_{2i})/f_{3i}$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Onde:

$$f_{1i} = -A \left\{ - \left[2An_i(1 - n_i) + \frac{(1 - 2n_i)}{2} \right] w_i + k(1 - n_i) \left[\frac{2n_i(A - 1) + 1}{2} \right] + \frac{\{1 + 2A[A(1 - 2n_i) - 1]\}}{A} j_i^2 \right\} w_i$$

$$f_{1^{a_{i-1/2}}} = -A \left\{ - \left[2An_{i-1/2}^a(1 - n_{i-1/2}^a) + \frac{(1 - 2n_{i-1/2}^a)}{2} \right] w_{i-1/2}^a + k(1 - n_{i-1/2}^a) \left[\frac{2n_{i-1/2}^a(A - 1) + 1}{2} \right] + \frac{\{1 + 2A[A(1 - 2n_{i-1/2}^a) - 1]\}}{A} j_{i-1/2}^{a^2} \right\} w_{i-1/2}^a$$

⋮

$$f_{2i} = -k \left\{ (A - 1)(1 - n_i) - A \left[A(1 - 2n_i) - \left(\frac{3}{2} - 2n_i \right) \right] \right\} j_i^2$$

$$f_{2^{a_{i-1/2}}} = -k \left\{ (A - 1)(1 - n_{i-1/2}^a) - A \left[A(1 - 2n_{i-1/2}^a) - \left(\frac{3}{2} - 2n_{i-1/2}^a \right) \right] \right\} j_{i-1/2}^{a^2}$$

⋮

$$f_{3i} = A \left[2An_i(1 - n_i) + \frac{(1 - 2n_i)}{2} \right] j_i$$

$$f_{3^{a_{i-1/2}}} = A \left[2An_{i-1/2}^a(1 - n_{i-1/2}^a) + \frac{(1 - 2n_{i-1/2}^a)}{2} \right] j_{i-1/2}^a$$

⋮

APÊNDICE C – Perfis: Teste VIII

São apresentados os primeiros 1050 perfis (de um total de 3410) do Teste VIII, o qual apresenta as condições:

- $0,001 \leq k \leq 0,005$, com $\Delta k = 1 \times 10^{-4}$;
- Erro admitido para $n(0)$ de $\pm 0,1\%$;
- $0,01 \leq A \leq 1$, com $\Delta A = 1 \times 10^{-3}$;
- $-0,08 \leq n'''(1) \leq -0,01$, com $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-4}$;
- $-50 < n'(0) \leq 0$;
- $0 \leq z^* \leq 1$, com $\Delta z^* = 1 \times 10^{-4}$.

Nº	k	A	n'''(1)	C	Nº	k	A	n'''(1)	C	Nº	k	A	n'''(1)	C
1	0,001	0,266	-0,0223	4042,311	55	0,001	0,461	-0,013	5564,019	109	0,0011	0,332	-0,0159	3266,441
2	0,001	0,266	-0,0259	4687,698	56	0,001	0,462	-0,013	5581,135	110	0,0011	0,358	-0,0154	3549,02
3	0,001	0,266	-0,0432	117,9738	57	0,001	0,464	-0,0126	5496,894	111	0,0011	0,371	-0,0152	3705,886
4	0,001	0,266	-0,0482	1,099029	58	0,001	0,484	-0,0129	6053,718	112	0,0011	0,391	-0,015	3980,578
5	0,001	0,266	-0,0514	0,8166502	59	0,001	0,501	-0,0127	6373,378	113	0,0011	0,419	-0,0146	4349,452
6	0,001	0,266	-0,0537	0,7139765	60	0,001	0,547	-0,0126	7608,532	114	0,0011	0,42	-0,0146	4372,071
7	0,001	0,266	-0,0562	0,7255806	61	0,001	0,564	-0,0125	8089,35	115	0,0011	0,448	-0,0143	4794,975
8	0,001	0,268	-0,0209	3819,203	62	0,001	0,661	-0,0122	11755,25	116	0,0011	0,457	-0,0141	4899,497
9	0,001	0,268	-0,0323	5921,803	63	0,0011	0,266	-0,0461	196,0109	117	0,0011	0,457	-0,0142	4938,547
10	0,001	0,268	-0,036	4993,638	64	0,0011	0,266	-0,0538	0,8534304	118	0,0011	0,485	-0,014	5452,907
11	0,001	0,268	-0,0697	0,7700411	65	0,0011	0,266	-0,067	0,7431855	119	0,0011	0,487	-0,014	5498,304
12	0,001	0,269	-0,0333	6049,866	66	0,0011	0,266	-0,069	0,7496578	120	0,0011	0,75	-0,0132	15844,03
13	0,001	0,27	-0,0498	0,7909619	67	0,0011	0,266	-0,0764	0,7704606	121	0,0012	0,266	-0,0233	2941,262
14	0,001	0,271	-0,0186	3451,014	68	0,0011	0,267	-0,0683	0,7472296	122	0,0012	0,266	-0,0244	3063,709
15	0,001	0,271	-0,0325	5960,853	69	0,0011	0,268	-0,0304	4595,413	123	0,0012	0,266	-0,0294	3694,348
16	0,001	0,273	-0,0648	0,7557808	70	0,0011	0,269	-0,0189	2869,654	124	0,0012	0,266	-0,0359	4517,16
17	0,001	0,274	-0,0168	3165,738	71	0,0011	0,269	-0,0255	3890,103	125	0,0012	0,266	-0,0391	4899,218
18	0,001	0,275	-0,034	6409,783	72	0,0011	0,271	-0,0308	4732,786	126	0,0012	0,266	-0,0396	4856,627
19	0,001	0,276	-0,0197	3763,568	73	0,0011	0,272	-0,0353	5457,071	127	0,0012	0,266	-0,0437	12908,77
20	0,001	0,276	-0,0242	4619,044	74	0,0011	0,275	-0,0397	4589,24	128	0,0012	0,266	-0,0627	0,7828175
21	0,001	0,276	-0,0268	5096,401	75	0,0011	0,276	-0,0219	3441,486	129	0,0012	0,267	-0,0423	4738,533
22	0,001	0,277	-0,02	3827,114	76	0,0011	0,276	-0,0542	1,157438	130	0,0012	0,268	-0,0428	4033,339
23	0,001	0,277	-0,0202	3861,531	77	0,0011	0,276	-0,0643	0,7350151	131	0,0012	0,268	-0,0502	496,7237
24	0,001	0,277	-0,0207	3971,149	78	0,0011	0,277	-0,0343	5454,228	132	0,0012	0,268	-0,0723	0,7422939
25	0,001	0,277	-0,0227	4352,288	79	0,0011	0,277	-0,0547	0,8863559	133	0,0012	0,27	-0,0463	877,1167
26	0,001	0,279	-0,0173	3355,237	80	0,0011	0,278	-0,0213	3394,76	134	0,0012	0,271	-0,0605	0,7326851
27	0,001	0,28	-0,0395	2402,395	81	0,0011	0,278	-0,0283	4495,085	135	0,0012	0,271	-0,0769	0,7560428
28	0,001	0,281	-0,0207	4043,834	82	0,0011	0,278	-0,0376	5784,688	136	0,0012	0,272	-0,0539	6,940374
29	0,001	0,283	-0,0451	32,22025	83	0,0011	0,278	-0,0416	3307,383	137	0,0012	0,272	-0,0564	1,422978
30	0,001	0,283	-0,0629	0,7507572	84	0,0011	0,279	-0,0427	1975,924	138	0,0012	0,275	-0,0673	0,7267593
31	0,001	0,284	-0,0229	4540,607	85	0,0011	0,279	-0,0545	1,052775	139	0,0012	0,276	-0,0281	3731,281
32	0,001	0,284	-0,0233	4628,572	86	0,0011	0,28	-0,0212	3414,209	140	0,0012	0,276	-0,0337	4466,409
33	0,001	0,284	-0,0403	1713,756	87	0,0011	0,28	-0,035	5628,271	141	0,0012	0,276	-0,0424	6481,788
34	0,001	0,285	-0,0324	6400,375	88	0,0011	0,28	-0,0355	5717,405	142	0,0012	0,276	-0,0436	9048,59
35	0,001	0,286	-0,0349	7396,752	89	0,0011	0,28	-0,0527	1,700166	143	0,0012	0,276	-0,0439	4195,662
36	0,001	0,286	-0,0705	0,7747982	90	0,0011	0,28	-0,06	0,7313176	144	0,0012	0,277	-0,0524	15,15182
37	0,001	0,287	-0,0177	3565,826	91	0,0011	0,282	-0,0647	0,7379424	145	0,0012	0,278	-0,0216	2889,717
38	0,001	0,287	-0,0663	0,7630798	92	0,0011	0,282	-0,0667	0,7444495	146	0,0012	0,278	-0,0228	3054,02
39	0,001	0,288	-0,0156	3157,184	93	0,0011	0,283	-0,0212	3456,28	147	0,0012	0,278	-0,0742	0,74923
40	0,001	0,29	-0,0592	0,7388714	94	0,0011	0,284	-0,0322	5283,938	148	0,0012	0,279	-0,0712	0,7406648
41	0,001	0,29	-0,0617	0,7478415	95	0,0011	0,284	-0,0523	1,215395	149	0,0012	0,28	-0,0359	4848,319
42	0,001	0,304	-0,0151	3298,866	96	0,0011	0,285	-0,0218	3582,917	150	0,0012	0,28	-0,0519	38,80071
43	0,001	0,306	-0,0149	3287,326	97	0,0011	0,286	-0,0588	0,7481973	151	0,0012	0,281	-0,0362	4910,587
44	0,001	0,307	-0,0139	3142,305	98	0,0011	0,287	-0,0343	5725,305	152	0,0012	0,283	-0,0268	3684,338
45	0,001	0,311	-0,0149	3363,544	99	0,0011	0,288	-0,0287	4801,113	153	0,0012	0,283	-0,0338	4641,945
46	0,001	0,317	-0,0148	3435,549	100	0,0011	0,288	-0,0535	0,9083239	154	0,0012	0,284	-0,0551	3,206737
47	0,001	0,335	-0,0143	3605,073	101	0,0011	0,289	-0,0371	6659,203	155	0,0012	0,285	-0,0325	4488,292
48	0,001	0,352	-0,0142	3858,03	102	0,0011	0,291	-0,0225	3813,486	156	0,0012	0,288	-0,0246	3461,392
49	0,001	0,373	-0,0139	4135,392	103	0,0011	0,291	-0,0714	0,7602195	157	0,0012	0,288	-0,0287	4041,694
50	0,001	0,417	-0,0134	4790,79	104	0,0011	0,299	-0,0167	2944,092	158	0,0012	0,288	-0,0776	0,7601965
51	0,001	0,427	-0,0133	4958,472	105	0,0011	0,301	-0,0166	2955,051	159	0,0012	0,289	-0,0196	2769,532
52	0,001	0,442	-0,0132	5227,072	106	0,0011	0,313	-0,0163	3069,739	160	0,0012	0,292	-0,0272	3896,008
53	0,001	0,452	-0,0131	5406,056	107	0,0011	0,328	-0,0158	3189,245	161	0,0012	0,292	-0,0389	5670,746
54	0,001	0,46	-0,013	5537,646	108	0,0011	0,33	-0,0159	3236,817	162	0,0012	0,293	-0,0645	0,9038558

N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C
163	0,0012	0,293	-0,0772	0,7599421	237	0,0013	0,302	-0,0192	2458,504	311	0,0014	0,313	-0,0201	2335,861
164	0,0012	0,294	-0,0629	0,7180442	238	0,0013	0,302	-0,0193	2471,663	312	0,0014	0,337	-0,0196	2541,498
165	0,0012	0,296	-0,0182	2657,186	239	0,0013	0,306	-0,0192	2505,25	313	0,0014	0,348	-0,0194	2642,84
166	0,0012	0,297	-0,0183	2683,236	240	0,0013	0,325	-0,0187	2664,934	314	0,0014	0,36	-0,0191	2743,107
167	0,0012	0,297	-0,0276	4049,229	241	0,0013	0,329	-0,0186	2699,276	315	0,0014	0,379	-0,0188	2927,275
168	0,0012	0,298	-0,0181	2669,615	242	0,0013	0,338	-0,0183	2764,953	316	0,0014	0,384	-0,0187	2974,961
169	0,0012	0,303	-0,0179	2703,367	243	0,0013	0,354	-0,018	2920,049	317	0,0014	0,389	-0,0187	3038,275
170	0,0012	0,306	-0,0178	2726,052	244	0,0013	0,386	-0,0175	3255,76	318	0,0014	0,392	-0,0182	3001,259
171	0,0012	0,311	-0,0177	2774,845	245	0,0013	0,397	-0,0173	3370,216	319	0,0014	0,4	-0,0184	3127,786
172	0,0012	0,319	-0,0175	2847,446	246	0,0013	0,404	-0,0167	3350,637	320	0,0014	0,414	-0,0182	3283,19
173	0,0012	0,348	-0,0169	3132,969	247	0,0013	0,414	-0,017	3552,03	321	0,0014	0,493	-0,0175	4341,981
174	0,0012	0,349	-0,0169	3146,883	248	0,0013	0,444	-0,0167	3944,35	322	0,0014	0,494	-0,0173	4305,001
175	0,0012	0,351	-0,0168	3156,169	249	0,0013	0,457	-0,0166	4135,074	323	0,0014	0,508	-0,0172	4538,424
176	0,0012	0,357	-0,0164	3161,212	250	0,0013	0,469	-0,0165	4311,816	324	0,0014	0,508	-0,0173	4559,339
177	0,0012	0,383	-0,0163	3513,514	251	0,0013	0,47	-0,0164	4304,743	325	0,0014	0,548	-0,0171	5289,851
178	0,0012	0,403	-0,016	3752,779	252	0,0013	0,474	-0,0164	4372,232	326	0,0014	0,56	-0,0165	4963,514
179	0,0012	0,406	-0,016	3797,25	253	0,0013	0,513	-0,0161	5018,232	327	0,0014	0,572	-0,0166	5618,056
180	0,0012	0,407	-0,0159	3789,499	254	0,0013	0,534	-0,016	5423,312	328	0,0014	0,576	-0,0168	5824,013
181	0,0012	0,436	-0,0156	4188,514	255	0,0013	0,561	-0,0158	5978,345	329	0,0014	0,602	-0,0166	6103,514
182	0,0012	0,479	-0,0152	4848,737	256	0,0013	0,591	-0,0156	6641,075	330	0,0014	0,659	-0,0166	8175,467
183	0,0012	0,482	-0,0151	4872,871	257	0,0013	0,595	-0,0157	6822,373	331	0,0015	0,266	-0,0329	2644,387
184	0,0012	0,487	-0,0152	5012,231	258	0,0013	0,643	-0,0154	7173,81	332	0,0015	0,266	-0,0464	3746,241
185	0,0012	0,525	-0,0147	5603,479	259	0,0013	0,644	-0,0156	8319,561	333	0,0015	0,266	-0,0542	23827,68
186	0,0012	0,546	-0,0149	6223	260	0,0014	0,266	-0,0284	2624,167	334	0,0015	0,266	-0,0609	240,3551
187	0,0012	0,566	-0,0145	6487,054	261	0,0014	0,266	-0,0303	2805,456	335	0,0015	0,267	-0,0424	3434,349
188	0,0012	0,583	-0,0144	6674,044	262	0,0014	0,266	-0,0313	2887,654	336	0,0015	0,267	-0,0474	3810,877
189	0,0013	0,266	-0,0268	2870,995	263	0,0014	0,267	-0,0275	2563,66	337	0,0015	0,27	-0,025	2060,611
190	0,0013	0,266	-0,0303	3243,678	264	0,0014	0,267	-0,0651	1,632868	338	0,0015	0,27	-0,0458	3761,732
191	0,0013	0,266	-0,0368	3955,576	265	0,0014	0,267	-0,0671	1,344787	339	0,0015	0,271	-0,0452	3741,983
192	0,0013	0,266	-0,0421	4546,432	266	0,0014	0,268	-0,0359	3355,992	340	0,0015	0,274	-0,0416	3485,065
193	0,0013	0,266	-0,0462	3679,636	267	0,0014	0,268	-0,0558	466,0974	341	0,0015	0,276	-0,033	2803,372
194	0,0013	0,266	-0,0528	618,0315	268	0,0014	0,268	-0,0559	217,5411	342	0,0015	0,276	-0,0715	0,8589095
195	0,0013	0,266	-0,0632	5,355421	269	0,0014	0,268	-0,067	0,9314813	343	0,0015	0,276	-0,0765	0,7202568
196	0,0013	0,266	-0,0754	0,7346874	270	0,0014	0,27	-0,0353	3334,827	344	0,0015	0,277	-0,0263	2234,445
197	0,0013	0,269	-0,022	2393,006	271	0,0014	0,273	-0,0323	3102,955	345	0,0015	0,277	-0,0495	4306,103
198	0,0013	0,269	-0,0466	5750,303	272	0,0014	0,275	-0,041	3967,822	346	0,0015	0,277	-0,0503	4545,439
199	0,0013	0,269	-0,0766	0,7383986	273	0,0014	0,275	-0,0701	0,7284432	347	0,0015	0,277	-0,0728	0,8990237
200	0,0013	0,27	-0,0396	4335,912	274	0,0014	0,276	-0,0458	4598,448	348	0,0015	0,277	-0,0738	0,8541407
201	0,0013	0,27	-0,0594	13,42891	275	0,0014	0,276	-0,0545	997,845	349	0,0015	0,278	-0,0549	12125,67
202	0,0013	0,271	-0,0623	1,811499	276	0,0014	0,276	-0,0774	0,7504359	350	0,0015	0,278	-0,0708	0,9963722
203	0,0013	0,271	-0,0686	0,71532	277	0,0014	0,277	-0,0379	3709,038	351	0,0015	0,279	-0,0336	2884,676
204	0,0013	0,271	-0,0787	0,7454326	278	0,0014	0,277	-0,0426	4159,485	352	0,0015	0,279	-0,0435	3740,339
205	0,0013	0,272	-0,0318	3506,614	279	0,0014	0,277	-0,0472	4693,859	353	0,0015	0,28	-0,0422	3652,142
206	0,0013	0,273	-0,0214	2376,187	280	0,0014	0,277	-0,0698	0,7980131	354	0,0015	0,282	-0,024	2095,945
207	0,0013	0,273	-0,047	6902,198	281	0,0014	0,279	-0,0638	2,922813	355	0,0015	0,282	-0,0272	2369,298
208	0,0013	0,276	-0,0319	3606,007	282	0,0014	0,279	-0,0771	0,726068	356	0,0015	0,282	-0,0719	0,8078539
209	0,0013	0,276	-0,0335	3782,134	283	0,0014	0,28	-0,0228	2264,716	357	0,0015	0,284	-0,0413	3632,861
210	0,0013	0,276	-0,0409	4627,067	284	0,0014	0,281	-0,0227	2260,507	358	0,0015	0,285	-0,0234	2071,679
211	0,0013	0,276	-0,0465	8604,81	285	0,0014	0,281	-0,0284	2829,367	359	0,0015	0,285	-0,047	4123,184
212	0,0013	0,276	-0,0566	10,64056	286	0,0014	0,282	-0,0264	2646,627	360	0,0015	0,286	-0,0232	2066,316
213	0,0013	0,276	-0,0702	0,7283645	287	0,0014	0,282	-0,0318	3192,588	361	0,0015	0,287	-0,0232	2076,82
214	0,0013	0,277	-0,0248	2819,586	288	0,0014	0,282	-0,0348	3490,275	362	0,0015	0,287	-0,0237	2124,675
215	0,0013	0,277	-0,031	3507,076	289	0,0014	0,282	-0,0385	3848,681	363	0,0015	0,289	-0,0796	0,7220593
216	0,0013	0,277	-0,0398	4523,074	290	0,0014	0,283	-0,032	3223,283	364	0,0015	0,29	-0,0229	2080,551
217	0,0013	0,278	-0,0506	1318,937	291	0,0014	0,283	-0,0401	4036,444	365	0,0015	0,29	-0,0392	3565,054
218	0,0013	0,278	-0,0511	1237,05	292	0,0014	0,283	-0,0769	0,7290061	366	0,0015	0,291	-0,0244	2226,736
219	0,0013	0,279	-0,0204	2337,079	293	0,0014	0,285	-0,0297	3026,05	367	0,0015	0,293	-0,0227	2093,048
220	0,0013	0,281	-0,0446	5161,26	294	0,0014	0,285	-0,0424	4324,479	368	0,0015	0,294	-0,0491	4268,724
221	0,0013	0,282	-0,0596	2,824543	295	0,0014	0,286	-0,0241	2464,057	369	0,0015	0,297	-0,0225	2112,379
222	0,0013	0,283	-0,039	4551,698	296	0,0014	0,286	-0,0368	3767,682	370	0,0015	0,298	-0,0277	2607,987
223	0,0013	0,284	-0,0211	2473,145	297	0,0014	0,286	-0,041	4190,487	371	0,0015	0,302	-0,0219	2106,471
224	0,0013	0,284	-0,0229	2691,127	298	0,0014	0,287	-0,0232	2382,885	372	0,0015	0,335	-0,0208	2327,533
225	0,0013	0,286	-0,0204	2417,384	299	0,0014	0,287	-0,0591	109,1959	373	0,0015	0,34	-0,0208	2383,322
226	0,0013	0,286	-0,0578	10,46944	300	0,0014	0,288	-0,072	0,7160085	374	0,0015	0,344	-0,0201	2353,636
227	0,0013	0,286	-0,0788	0,7479325	301	0,0014	0,289	-0,0239	2473,644	375	0,0015	0,356	-0,0198	2434,186
228	0,0013	0,288	-0,0202	2418,194	302	0,0014	0,289	-0,0446	4612,192	376	0,0015	0,39	-0,0197	2799,254
229	0,0013	0,289	-0,0202	2428,38	303	0,0014	0,29	-0,0404	4207,857	377	0,0015	0,394	-0,0197	2847,86
230	0,0013	0,29	-0,0389	4701,444	304	0,0014	0,29	-0,0653	1,172139	378	0,0015	0,429	-0,0192	3206,885
231	0,0013	0,291	-0,0198	2407,058	305	0,0014	0,291	-0,0379	3978,268	379	0,0015	0,445	-0,019	3385,435
232	0,0013	0,292	-0,0544	267,3134	306	0,0014	0,293	-0,074	0,7226941	380	0,0015	0,453	-0,0189	3481,891
233	0,0013	0,293	-0,0544	262,8336	307	0,0014	0,294	-0,0362	3841,098	381	0,0015	0,468	-0,0188	3677,165
234	0,0013	0,295	-0,02	2475,631	308	0,0014	0,294	-0,0383	4075,958	382	0,0015	0,469	-0,0188	3689,739
235	0,0013	0,298	-0,0758	0,741304	309	0,0014	0,297	-0,0238	2561,629	383	0,0015	0,472	-0,0187	3718,997
236	0,0013	0,3	-0,0194	2461,192	310	0,0014	0,304	-0,0206	2296,04	384	0,0015	0,476	-0,0187	3774,998

N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C
385	0,0015	0,484	-0,0187	3898,708	459	0,0016	0,402	-0,0208	2733,163	533	0,0017	0,441	-0,0214	2922,974
386	0,0015	0,486	-0,0186	3908,728	460	0,0016	0,425	-0,0204	2947,48	534	0,0017	0,446	-0,0212	2955,452
387	0,0015	0,508	-0,0184	4220,261	461	0,0016	0,426	-0,0204	2958,839	535	0,0017	0,451	-0,0212	3011,856
388	0,0015	0,51	-0,0184	4255,502	462	0,0016	0,487	-0,0198	3672,116	536	0,0017	0,451	-0,0213	3028,624
389	0,0015	0,518	-0,0183	4370,509	463	0,0016	0,501	-0,0193	3788,991	537	0,0017	0,466	-0,0209	3153,867
390	0,0015	0,6	-0,0177	5882,885	464	0,0016	0,505	-0,0196	3906,875	538	0,0017	0,476	-0,0209	3285,146
391	0,0015	0,625	-0,0176	6467,465	465	0,0016	0,644	-0,0187	6581,244	539	0,0017	0,48	-0,0208	3322,932
392	0,0016	0,266	-0,0314	2226,855	466	0,0016	0,703	-0,0186	8344,847	540	0,0017	0,504	-0,0202	3537,295
393	0,0016	0,266	-0,0335	2376,915	467	0,0016	0,729	-0,0185	9465,886	541	0,0017	0,517	-0,0204	3772,483
394	0,0016	0,266	-0,0376	2666,137	468	0,0017	0,266	-0,0448	2802,12	542	0,0017	0,543	-0,0203	4173,289
395	0,0016	0,266	-0,0457	3233,117	469	0,0017	0,266	-0,0465	2919,9	543	0,0017	0,563	-0,0201	4457,298
396	0,0016	0,266	-0,048	3395,432	470	0,0017	0,266	-0,0658	859,9163	544	0,0017	0,586	-0,0201	4922,462
397	0,0016	0,266	-0,0509	3578,972	471	0,0017	0,267	-0,034	2140,866	545	0,0017	0,592	-0,0201	5046,389
398	0,0016	0,267	-0,0312	2227,267	472	0,0017	0,267	-0,039	2456,556	546	0,0018	0,266	-0,0422	2360,448
399	0,0016	0,267	-0,0373	2647,432	473	0,0017	0,267	-0,0526	3327,795	547	0,0018	0,266	-0,0526	2942,714
400	0,0016	0,267	-0,0422	3009,367	474	0,0017	0,269	-0,0284	1812,481	548	0,0018	0,266	-0,0698	367,7888
401	0,0016	0,267	-0,0429	3059,721	475	0,0017	0,269	-0,0331	2105,894	549	0,0018	0,267	-0,063	5139,714
402	0,0016	0,267	-0,0463	3292,21	476	0,0017	0,269	-0,0492	3134,776	550	0,0018	0,268	-0,0741	53,53553
403	0,0016	0,269	-0,0415	2986,913	477	0,0017	0,27	-0,0747	4,333335	551	0,0018	0,269	-0,0609	3167,871
404	0,0016	0,269	-0,051	3684,035	478	0,0017	0,271	-0,0438	2824,915	552	0,0018	0,269	-0,0623	3478,125
405	0,0016	0,269	-0,0789	0,8110345	479	0,0017	0,272	-0,0323	2085,413	553	0,0018	0,27	-0,0497	2839,975
406	0,0016	0,271	-0,0429	3120,997	480	0,0017	0,273	-0,0588	3068,302	554	0,0018	0,272	-0,0408	2346,924
407	0,0016	0,271	-0,0441	3199,797	481	0,0017	0,274	-0,0764	9,997799	555	0,0018	0,273	-0,0583	3270,304
408	0,0016	0,271	-0,0781	0,7590554	482	0,0017	0,275	-0,0457	3003,41	556	0,0018	0,273	-0,0615	3857,364
409	0,0016	0,273	-0,0303	2224,206	483	0,0017	0,276	-0,0338	2232,658	557	0,0018	0,275	-0,0287	1677,954
410	0,0016	0,273	-0,0537	3658,125	484	0,0017	0,276	-0,0546	3480,862	558	0,0018	0,275	-0,0387	2265,128
411	0,0016	0,274	-0,0507	3752,534	485	0,0017	0,276	-0,0649	561,239	559	0,0018	0,276	-0,0348	2042,685
412	0,0016	0,274	-0,0523	4036,6	486	0,0017	0,276	-0,0763	2,653264	560	0,0018	0,276	-0,0353	2083,084
413	0,0016	0,274	-0,0556	6059,912	487	0,0017	0,277	-0,0467	3089,434	561	0,0018	0,276	-0,0472	2775,887
414	0,0016	0,275	-0,0401	2969,231	488	0,0017	0,277	-0,062	2200,718	562	0,0018	0,276	-0,0515	3028,694
415	0,0016	0,276	-0,0258	1925,711	489	0,0017	0,278	-0,0292	1943,686	563	0,0018	0,276	-0,0545	3223,121
416	0,0016	0,276	-0,0297	2215,135	490	0,0017	0,278	-0,0389	2588,246	564	0,0018	0,276	-0,0648	1776,628
417	0,0016	0,276	-0,031	2314,984	491	0,0017	0,278	-0,0416	2768,445	565	0,0018	0,276	-0,0708	142,7871
418	0,0016	0,276	-0,044	3283,023	492	0,0017	0,278	-0,0744	5,011871	566	0,0018	0,277	-0,0346	2044,035
419	0,0016	0,276	-0,0463	3447,299	493	0,0017	0,279	-0,0277	1852,945	567	0,0018	0,277	-0,0682	593,859
420	0,0016	0,276	-0,0696	7,892161	494	0,0017	0,28	-0,0383	2581,64	568	0,0018	0,277	-0,0786	4,02396
421	0,0016	0,276	-0,0718	5,51507	495	0,0017	0,281	-0,0483	3266,606	569	0,0018	0,278	-0,0332	1969,444
422	0,0016	0,276	-0,0754	2,378665	496	0,0017	0,281	-0,0676	344,5143	570	0,0018	0,279	-0,0323	1935,408
423	0,0016	0,277	-0,035	2616,343	497	0,0017	0,281	-0,0701	55,58579	571	0,0018	0,279	-0,039	2328,752
424	0,0016	0,277	-0,0759	0,9040875	498	0,0017	0,282	-0,0285	1940,101	572	0,0018	0,279	-0,0517	3088,961
425	0,0016	0,278	-0,0764	0,832233	499	0,0017	0,282	-0,0294	1999,111	573	0,0018	0,281	-0,0353	2133,301
426	0,0016	0,279	-0,0362	2741,348	500	0,0017	0,282	-0,0322	2189,907	574	0,0018	0,281	-0,0627	5049,087
427	0,0016	0,28	-0,0262	1986,597	501	0,0017	0,282	-0,0338	2298,291	575	0,0018	0,281	-0,0752	47,02095
428	0,0016	0,28	-0,032	2437,267	502	0,0017	0,283	-0,0265	1813,752	576	0,0018	0,282	-0,072	381,6173
429	0,0016	0,28	-0,0321	2433,336	503	0,0017	0,283	-0,0688	276,8982	577	0,0018	0,283	-0,0765	10,76661
430	0,0016	0,28	-0,0474	3597,927	504	0,0017	0,284	-0,0317	2175,224	578	0,0018	0,285	-0,0276	1696,524
431	0,0016	0,28	-0,0556	5954,57	505	0,0017	0,284	-0,0529	3679,85	579	0,0018	0,286	-0,0275	1700,672
432	0,0016	0,281	-0,0298	2269,498	506	0,0017	0,284	-0,0621	1961,727	580	0,0018	0,286	-0,0611	3310,193
433	0,0016	0,281	-0,0332	2535,147	507	0,0017	0,285	-0,0283	1947,577	581	0,0018	0,287	-0,0313	1947,766
434	0,0016	0,281	-0,0639	465,9573	508	0,0017	0,285	-0,054	3627,08	582	0,0018	0,288	-0,0618	2804,782
435	0,0016	0,282	-0,0622	1264,136	509	0,0017	0,286	-0,0261	1809,963	583	0,0018	0,288	-0,0655	20419,79
436	0,0016	0,283	-0,0337	2597,332	510	0,0017	0,286	-0,0449	3112,023	584	0,0018	0,288	-0,0752	28,06698
437	0,0016	0,283	-0,0733	1,397474	511	0,0017	0,287	-0,0611	2477,547	585	0,0018	0,289	-0,0529	3324,216
438	0,0016	0,284	-0,0514	4069,721	512	0,0017	0,288	-0,0467	3266,915	586	0,0018	0,29	-0,0418	2641,29
439	0,0016	0,284	-0,0789	0,7331726	513	0,0017	0,29	-0,0589	4009,315	587	0,0018	0,29	-0,0565	3582,125
440	0,0016	0,285	-0,0438	3413,78	514	0,0017	0,291	-0,0311	2213,243	588	0,0018	0,29	-0,0773	15,01935
441	0,0016	0,285	-0,0559	5479,181	515	0,0017	0,297	-0,038	2786,123	589	0,0018	0,292	-0,0266	1694,394
442	0,0016	0,285	-0,0609	1181,018	516	0,0017	0,299	-0,0249	1837,91	590	0,0018	0,293	-0,0266	1702,826
443	0,0016	0,286	-0,0304	2378,049	517	0,0017	0,301	-0,0248	1848,128	591	0,0018	0,293	-0,0273	1748,05
444	0,0016	0,286	-0,0311	2426,574	518	0,0017	0,304	-0,0246	1860,141	592	0,0018	0,293	-0,053	3385,917
445	0,0016	0,291	-0,0484	3897,328	519	0,0017	0,32	-0,0235	1917,688	593	0,0018	0,294	-0,0267	1716,498
446	0,0016	0,294	-0,0239	1944,723	520	0,0017	0,32	-0,0236	1922,816	594	0,0018	0,295	-0,0306	1976,699
447	0,0016	0,297	-0,0262	2161,581	521	0,0017	0,329	-0,0224	1914,52	595	0,0018	0,295	-0,0376	2425,504
448	0,0016	0,3	-0,0235	1968,133	522	0,0017	0,329	-0,0237	2011,33	596	0,0018	0,296	-0,0291	1890,005
449	0,0016	0,316	-0,0229	2067,268	523	0,0017	0,332	-0,0236	2029,822	597	0,0018	0,304	-0,026	1753,704
450	0,0016	0,323	-0,0226	2107,001	524	0,0017	0,334	-0,0226	1966,294	598	0,0018	0,323	-0,0251	1848,882
451	0,0016	0,331	-0,0217	2103,969	525	0,0017	0,371	-0,0226	2307,105	599	0,0018	0,325	-0,0252	1873,398
452	0,0016	0,338	-0,0221	2205,693	526	0,0017	0,381	-0,0222	2367,421	600	0,0018	0,336	-0,0248	1937,455
453	0,0016	0,341	-0,0222	2244,568	527	0,0017	0,399	-0,022	2526,522	601	0,0018	0,341	-0,0246	1965,617
454	0,0016	0,345	-0,022	2264,88	528	0,0017	0,401	-0,022	2549,76	602	0,0018	0,35	-0,0235	1955,855
455	0,0016	0,349	-0,0219	2293,95	529	0,0017	0,407	-0,0216	2563,342	603	0,0018	0,378	-0,0237	2223,201
456	0,0016	0,353	-0,0217	2313,538	530	0,0017	0,429	-0,0215	2794,024	604	0,0018	0,381	-0,0236	2242,228
457	0,0016	0,376	-0,0212	2497,924	531	0,0017	0,436	-0,0214	2862,339	605	0,0018	0,406	-0,0227	2399,526
458	0,0016	0,393	-0,021	2655,958	532	0,0017	0,441	-0,0213	2908,24	606	0,0018	0,447	-0,0224	2796,004

N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C
607	0,0018	0,483	-0,0218	3147,484	681	0,0019	0,36	-0,0254	1979,852	755	0,002	0,292	-0,0327	1684,85
608	0,0018	0,489	-0,0219	3236,878	682	0,0019	0,361	-0,0249	1947,947	756	0,002	0,292	-0,0517	2660,502
609	0,0018	0,498	-0,0217	3326,962	683	0,0019	0,364	-0,0251	1991,942	757	0,002	0,292	-0,0733	3669,52
610	0,0018	0,53	-0,0215	3742,698	684	0,0019	0,369	-0,0252	2042,078	758	0,002	0,294	-0,0785	116,7209
611	0,0018	0,533	-0,0212	3734,527	685	0,0019	0,385	-0,0247	2142,994	759	0,002	0,295	-0,0566	2960,386
612	0,0018	0,54	-0,0213	3856,464	686	0,0019	0,409	-0,0242	2321,579	760	0,002	0,296	-0,0712	1838,039
613	0,0018	0,54	-0,0214	3880,808	687	0,0019	0,423	-0,0239	2427,832	761	0,002	0,298	-0,029	1539,363
614	0,0018	0,545	-0,0214	3958,259	688	0,0019	0,428	-0,0238	2466,619	762	0,002	0,303	-0,0287	1560,52
615	0,0018	0,554	-0,021	4036,07	689	0,0019	0,434	-0,0237	2516,327	763	0,002	0,316	-0,0281	1623,867
616	0,0018	0,557	-0,0211	4085,494	690	0,0019	0,436	-0,0237	2537,37	764	0,002	0,324	-0,0278	1666,546
617	0,0018	0,664	-0,0208	6336,586	691	0,0019	0,486	-0,023	3014,263	765	0,002	0,332	-0,0275	1709,514
618	0,0019	0,266	-0,0498	2501,306	692	0,0019	0,735	-0,0215	7579,244	766	0,002	0,341	-0,0269	1741,124
619	0,0019	0,267	-0,0338	1708,241	693	0,002	0,266	-0,0397	1794,301	767	0,002	0,341	-0,0271	1754,265
620	0,0019	0,267	-0,0719	803,6511	694	0,002	0,266	-0,0412	1867,281	768	0,002	0,345	-0,0268	1764,17
621	0,0019	0,268	-0,0319	1617,343	695	0,002	0,266	-0,063	2798,905	769	0,002	0,345	-0,0269	1771,669
622	0,0019	0,268	-0,0537	2721,853	696	0,002	0,266	-0,0638	2811,569	770	0,002	0,349	-0,0269	1803,591
623	0,0019	0,269	-0,0374	1909,54	697	0,002	0,266	-0,0687	3255,394	771	0,002	0,35	-0,0268	1804,325
624	0,0019	0,27	-0,0435	2224,226	698	0,002	0,266	-0,0706	7710,309	772	0,002	0,366	-0,0263	1898,202
625	0,0019	0,271	-0,058	2978,312	699	0,002	0,267	-0,0416	1897,416	773	0,002	0,381	-0,0259	1993,566
626	0,0019	0,272	-0,045	2333,434	700	0,002	0,267	-0,064	2118,835	774	0,002	0,398	-0,0255	2107,667
627	0,0019	0,272	-0,0594	3017,437	701	0,002	0,267	-0,0655	2810,332	775	0,002	0,399	-0,0256	2125,618
628	0,0019	0,272	-0,0679	36208,99	702	0,002	0,268	-0,0421	1933,459	776	0,002	0,402	-0,0255	2143,793
629	0,0019	0,273	-0,0328	1703,74	703	0,002	0,269	-0,0681	4253,135	777	0,002	0,43	-0,0249	2348,64
630	0,0019	0,273	-0,0521	2707,644	704	0,002	0,27	-0,0677	3271,422	778	0,002	0,435	-0,0248	2387,127
631	0,0019	0,274	-0,058	3046,942	705	0,002	0,271	-0,0322	1498,608	779	0,002	0,435	-0,0249	2397,383
632	0,0019	0,275	-0,0627	3249,331	706	0,002	0,271	-0,0341	1586,77	780	0,002	0,436	-0,0248	2398,359
633	0,0019	0,276	-0,0344	1816,259	707	0,002	0,271	-0,0634	3032,336	781	0,002	0,448	-0,0243	2469,736
634	0,0019	0,276	-0,0369	1950,518	708	0,002	0,272	-0,0551	2575,983	782	0,002	0,451	-0,0246	2528,206
635	0,0019	0,276	-0,037	1952,014	709	0,002	0,273	-0,065	3172,902	783	0,002	0,453	-0,0245	2539,496
636	0,0019	0,276	-0,0759	98,39661	710	0,002	0,275	-0,0626	3033,005	784	0,002	0,458	-0,0245	2588,419
637	0,0019	0,277	-0,0326	1735,313	711	0,002	0,276	-0,0364	1731,358	785	0,002	0,466	-0,0241	2630,294
638	0,0019	0,277	-0,0419	2218,002	712	0,002	0,276	-0,0518	2465,628	786	0,002	0,484	-0,024	2813,305
639	0,0019	0,277	-0,0422	2246,467	713	0,002	0,276	-0,0567	2701,257	787	0,002	0,506	-0,0238	3045,591
640	0,0019	0,277	-0,044	2330,156	714	0,002	0,276	-0,0644	3197,538	788	0,002	0,564	-0,0234	3784,551
641	0,0019	0,277	-0,0505	2682,65	715	0,002	0,277	-0,0343	1644,488	789	0,002	0,568	-0,0232	3800,758
642	0,0019	0,278	-0,0476	2543,346	716	0,002	0,277	-0,0379	1814,862	790	0,002	0,57	-0,0232	3840,949
643	0,0019	0,278	-0,0508	2714,666	717	0,002	0,277	-0,0472	2263,491	791	0,002	0,572	-0,0234	3909,801
644	0,0019	0,278	-0,0746	197,903	718	0,002	0,277	-0,054	2586,112	792	0,002	0,584	-0,0233	4089,868
645	0,0019	0,279	-0,0295	1579,76	719	0,002	0,277	-0,063	2932,702	793	0,002	0,743	-0,0226	7910,221
646	0,0019	0,279	-0,0445	2388,314	720	0,002	0,277	-0,0641	2997,18	794	0,0021	0,266	-0,0412	1690,193
647	0,0019	0,279	-0,069	5083,903	721	0,002	0,277	-0,0657	3466,562	795	0,0021	0,266	-0,0464	1901,708
648	0,0019	0,279	-0,0699	12545,06	722	0,002	0,277	-0,07	5331,148	796	0,0021	0,266	-0,0567	2334,434
649	0,0019	0,28	-0,0298	1606,983	723	0,002	0,278	-0,0548	2636,114	797	0,0021	0,266	-0,0654	2655,785
650	0,0019	0,28	-0,0315	1694,109	724	0,002	0,278	-0,0653	2933,927	798	0,0021	0,268	-0,0556	2303,043
651	0,0019	0,281	-0,0474	2563,24	725	0,002	0,278	-0,069	2262,099	799	0,0021	0,268	-0,0608	2524,078
652	0,0019	0,281	-0,0494	2674,373	726	0,002	0,279	-0,0354	1710,54	800	0,0021	0,268	-0,0678	2939,408
653	0,0019	0,281	-0,0573	3080,444	727	0,002	0,279	-0,0567	2741,317	801	0,0021	0,269	-0,0471	1964,63
654	0,0019	0,282	-0,0367	2001,746	728	0,002	0,279	-0,0669	3117,565	802	0,0021	0,269	-0,0631	2626,944
655	0,0019	0,282	-0,0407	2216,949	729	0,002	0,28	-0,0664	3533,883	803	0,0021	0,27	-0,0476	1993,224
656	0,0019	0,283	-0,0468	2563,4	730	0,002	0,28	-0,0799	163,5875	804	0,0021	0,27	-0,063	2657,764
657	0,0019	0,283	-0,0785	27,11778	731	0,002	0,281	-0,0365	1789,167	805	0,0021	0,272	-0,0449	1903,665
658	0,0019	0,284	-0,0549	3017,322	732	0,002	0,281	-0,058	2832,645	806	0,0021	0,272	-0,0591	2505,829
659	0,0019	0,286	-0,05	2769,888	733	0,002	0,282	-0,0311	1526,362	807	0,0021	0,273	-0,0433	1845,668
660	0,0019	0,287	-0,032	1788,116	734	0,002	0,282	-0,0368	1806,828	808	0,0021	0,275	-0,0324	1394,374
661	0,0019	0,287	-0,0504	2817,855	735	0,002	0,282	-0,0588	2883,414	809	0,0021	0,275	-0,0396	1700,187
662	0,0019	0,288	-0,033	1855,287	736	0,002	0,282	-0,07	6266,392	810	0,0021	0,276	-0,0387	1669,38
663	0,0019	0,288	-0,0586	3294,99	737	0,002	0,284	-0,0316	1566,73	811	0,0021	0,276	-0,0552	2390,172
664	0,0019	0,288	-0,0622	3549,334	738	0,002	0,284	-0,0442	2195,027	812	0,0021	0,276	-0,06	2594,486
665	0,0019	0,289	-0,0366	2061,679	739	0,002	0,284	-0,0452	2238,493	813	0,0021	0,276	-0,0682	2857,303
666	0,0019	0,29	-0,0294	1663,818	740	0,002	0,284	-0,0599	2980,402	814	0,0021	0,276	-0,078	2387,788
667	0,0019	0,29	-0,0552	3124,196	741	0,002	0,284	-0,0752	440,311	815	0,0021	0,277	-0,0573	2486
668	0,0019	0,292	-0,0408	2324,64	742	0,002	0,285	-0,071	1535,724	816	0,0021	0,277	-0,0792	1266,656
669	0,0019	0,293	-0,0283	1626,198	743	0,002	0,286	-0,0353	1772,092	817	0,0021	0,278	-0,0332	1447,877
670	0,0019	0,294	-0,0289	1667,264	744	0,002	0,287	-0,0609	3040,44	818	0,0021	0,279	-0,0433	1901,306
671	0,0019	0,294	-0,0419	2417,715	745	0,002	0,287	-0,0696	4244,137	819	0,0021	0,28	-0,0317	1398,117
672	0,0019	0,295	-0,0574	3316,655	746	0,002	0,287	-0,0725	4243,658	820	0,0021	0,28	-0,0433	1904,975
673	0,0019	0,296	-0,0361	2099,586	747	0,002	0,288	-0,0308	1557,83	821	0,0021	0,28	-0,0573	2522,655
674	0,0019	0,298	-0,028	1648,34	748	0,002	0,288	-0,0719	1207,92	822	0,0021	0,28	-0,0741	2667,496
675	0,0019	0,312	-0,026	1632,841	749	0,002	0,289	-0,0326	1656,809	823	0,0021	0,281	-0,0584	2590,605
676	0,0019	0,314	-0,0268	1699,92	750	0,002	0,29	-0,0583	2971,678	824	0,0021	0,283	-0,0339	1520,353
677	0,0019	0,321	-0,0266	1742,76	751	0,002	0,29	-0,0631	3340,434	825	0,0021	0,283	-0,0513	2301,185
678	0,0019	0,322	-0,0264	1736,85	752	0,002	0,291	-0,0302	1549,199	826	0,0021	0,286	-0,0425	1934,469
679	0,0019	0,322	-0,0266	1750,722	753	0,002	0,291	-0,0482	2477,289	827	0,0021	0,286	-0,0529	2408,699
680	0,0019	0,328	-0,0262	1772,074	754	0,002	0,292	-0,0296	1525,569	828	0,0021	0,286	-0,0613	2782,136

N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C	N°	k	A	n'''(1)	C
829	0,0021	0,288	-0,0768	1118,149	903	0,0022	0,276	-0,0701	2710,007	977	0,0023	0,27	-0,0742	2564,229
830	0,0021	0,289	-0,0314	1448,351	904	0,0022	0,276	-0,0731	3002,979	978	0,0023	0,271	-0,0501	1756,783
831	0,0021	0,289	-0,0331	1526,453	905	0,0022	0,276	-0,0748	2174,523	979	0,0023	0,271	-0,0589	2067,223
832	0,0021	0,289	-0,0585	2696,66	906	0,0022	0,276	-0,0752	2328,374	980	0,0023	0,273	-0,0445	1582,397
833	0,0021	0,29	-0,0312	1444,427	907	0,0022	0,277	-0,0369	1464,357	981	0,0023	0,274	-0,0553	1971,447
834	0,0021	0,29	-0,0686	3253,451	908	0,0022	0,277	-0,0388	1535,919	982	0,0023	0,275	-0,0355	1274,926
835	0,0021	0,291	-0,0532	2483,536	909	0,0022	0,277	-0,043	1698,492	983	0,0023	0,275	-0,036	1294,237
836	0,0021	0,292	-0,0434	2036,221	910	0,0022	0,277	-0,0508	2013,808	984	0,0023	0,275	-0,0688	2484,528
837	0,0021	0,295	-0,0672	3130,206	911	0,0022	0,277	-0,0599	2372,642	985	0,0023	0,276	-0,0484	1742,804
838	0,0021	0,297	-0,0585	2800,415	912	0,0022	0,277	-0,0607	2405,287	986	0,0023	0,276	-0,0507	1825,687
839	0,0021	0,303	-0,03	1479,846	913	0,0022	0,277	-0,071	2919,975	987	0,0023	0,276	-0,0709	2579,318
840	0,0021	0,306	-0,0297	1485,84	914	0,0022	0,277	-0,0721	2848,102	988	0,0023	0,277	-0,039	1409,4
841	0,0021	0,309	-0,0296	1501,843	915	0,0022	0,278	-0,0383	1527,897	989	0,0023	0,277	-0,0567	2060,262
842	0,0021	0,32	-0,029	1548,071	916	0,0022	0,278	-0,0455	1808,407	990	0,0023	0,277	-0,0608	2199,77
843	0,0021	0,323	-0,029	1569,82	917	0,0022	0,279	-0,0352	1406,817	991	0,0023	0,277	-0,0652	2362,186
844	0,0021	0,333	-0,0286	1619,995	918	0,0022	0,279	-0,0392	1569,159	992	0,0023	0,278	-0,0394	1432,444
845	0,0021	0,346	-0,0279	1674,046	919	0,0022	0,279	-0,0516	2068,212	993	0,0023	0,278	-0,0569	2077,881
846	0,0021	0,36	-0,0278	1774,23	920	0,0022	0,279	-0,0599	2394,032	994	0,0023	0,279	-0,0421	1542,384
847	0,0021	0,362	-0,0277	1782,561	921	0,0022	0,279	-0,064	2554,149	995	0,0023	0,279	-0,0582	2128,341
848	0,0021	0,368	-0,0272	1798,234	922	0,0022	0,279	-0,0671	2657,231	996	0,0023	0,28	-0,0409	1501,501
849	0,0021	0,372	-0,0275	1847,88	923	0,0022	0,28	-0,0373	1502,344	997	0,0023	0,28	-0,0785	2889,226
850	0,0021	0,377	-0,0273	1874,478	924	0,0022	0,281	-0,0415	1679,649	998	0,0023	0,281	-0,0367	1359,9
851	0,0021	0,378	-0,0272	1876,044	925	0,0022	0,281	-0,0427	1725,996	999	0,0023	0,282	-0,0342	1271,397
852	0,0021	0,381	-0,027	1885,328	926	0,0022	0,281	-0,0556	2245,402	1000	0,0023	0,282	-0,0345	1283
853	0,0021	0,384	-0,0271	1916,498	927	0,0022	0,281	-0,0614	2480,906	1001	0,0023	0,282	-0,0575	2130,274
854	0,0021	0,393	-0,0268	1969,212	928	0,0022	0,282	-0,0467	1900,896	1002	0,0023	0,282	-0,0773	2190,857
855	0,0021	0,415	-0,0263	2117,064	929	0,0022	0,282	-0,0484	1966,543	1003	0,0023	0,284	-0,0576	2166,665
856	0,0021	0,426	-0,0261	2198,028	930	0,0022	0,283	-0,0395	1615,576	1004	0,0023	0,284	-0,0741	2778,905
857	0,0021	0,436	-0,0259	2269,909	931	0,0022	0,286	-0,0325	1346,2	1005	0,0023	0,285	-0,0346	1304,329
858	0,0021	0,437	-0,0259	2278,783	932	0,0022	0,289	-0,0322	1353,773	1006	0,0023	0,285	-0,0479	1800,554
859	0,0021	0,445	-0,0257	2336,311	933	0,0022	0,289	-0,0341	1430,313	1007	0,0023	0,285	-0,0578	2179,724
860	0,0021	0,451	-0,0257	2393,365	934	0,0022	0,29	-0,0605	2553,978	1008	0,0023	0,287	-0,0746	2756,81
861	0,0021	0,452	-0,0256	2394,397	935	0,0022	0,291	-0,0662	2795,269	1009	0,0023	0,288	-0,0687	2602,086
862	0,0021	0,457	-0,0254	2422,961	936	0,0022	0,291	-0,0787	9117,161	1010	0,0023	0,289	-0,0513	1972,349
863	0,0021	0,461	-0,0255	2475,41	937	0,0022	0,292	-0,04	1704,55	1011	0,0023	0,29	-0,0789	2089,153
864	0,0021	0,475	-0,0249	2564,691	938	0,0022	0,297	-0,0342	1494,109	1012	0,0023	0,291	-0,0337	1307,381
865	0,0021	0,496	-0,0251	2800,508	939	0,0022	0,298	-0,0316	1387,107	1013	0,0023	0,292	-0,0343	1337,902
866	0,0021	0,513	-0,025	2986,798	940	0,0022	0,299	-0,0657	2917,128	1014	0,0023	0,293	-0,0475	1865,705
867	0,0021	0,532	-0,0244	3147,265	941	0,0022	0,308	-0,0309	1421,641	1015	0,0023	0,293	-0,0679	2652,957
868	0,0021	0,548	-0,0244	3350,933	942	0,0022	0,359	-0,029	1678,826	1016	0,0023	0,295	-0,0796	10906,42
869	0,0021	0,565	-0,0243	3577,805	943	0,0022	0,359	-0,0291	1684,641	1017	0,0023	0,296	-0,0334	1328,025
870	0,0021	0,609	-0,024	4228,757	944	0,0022	0,369	-0,0288	1740,85	1018	0,0023	0,297	-0,033	1318,553
871	0,0021	0,613	-0,0237	3965,473	945	0,0022	0,378	-0,0277	1744,952	1019	0,0023	0,298	-0,0335	1344,521
872	0,0021	0,633	-0,0237	4181,632	946	0,0022	0,406	-0,0276	1948,664	1020	0,0023	0,3	-0,0328	1329,811
873	0,0021	0,641	-0,024	4837,479	947	0,0022	0,411	-0,0274	1977,033	1021	0,0023	0,309	-0,0323	1366,362
874	0,0021	0,678	-0,0236	5406,971	948	0,0022	0,415	-0,0274	2009,242	1022	0,0023	0,315	-0,032	1391,821
875	0,0021	0,681	-0,0234	4063,217	949	0,0022	0,42	-0,0271	2029,128	1023	0,0023	0,335	-0,0311	1481,818
876	0,0021	0,715	-0,0236	6524,473	950	0,0022	0,437	-0,027	2167,051	1024	0,0023	0,346	-0,0301	1508,952
877	0,0021	0,846	-0,0234	9866,21	951	0,0022	0,438	-0,027	2173,773	1025	0,0023	0,354	-0,0296	1531,119
878	0,0022	0,266	-0,0644	2412,845	952	0,0022	0,473	-0,0266	2467,375	1026	0,0023	0,362	-0,0301	1615,171
879	0,0022	0,266	-0,0732	2428,099	953	0,0022	0,474	-0,0265	2468,403	1027	0,0023	0,368	-0,0299	1646,915
880	0,0022	0,266	-0,0747	2228,866	954	0,0022	0,479	-0,0264	2509,04	1028	0,0023	0,376	-0,0297	1692,393
881	0,0022	0,266	-0,0792	3389,807	955	0,0022	0,491	-0,026	2591,185	1029	0,0023	0,381	-0,0294	1712,263
882	0,0022	0,266	-0,0799	920,1562	956	0,0022	0,494	-0,0258	2611,485	1030	0,0023	0,381	-0,0296	1722,962
883	0,0022	0,267	-0,038	1428,123	957	0,0022	0,505	-0,0259	2730,602	1031	0,0023	0,385	-0,0289	1711,168
884	0,0022	0,267	-0,0512	1924,565	958	0,0022	0,506	-0,0259	2745,12	1032	0,0023	0,385	-0,0292	1729,136
885	0,0022	0,267	-0,0543	2043,433	959	0,0022	0,511	-0,0259	2795,784	1033	0,0023	0,409	-0,0287	1879,407
886	0,0022	0,267	-0,0544	2051,888	960	0,0022	0,521	-0,0258	2899,127	1034	0,0023	0,412	-0,0287	1901,216
887	0,0022	0,267	-0,0794	2097,597	961	0,0022	0,531	-0,025	2837,448	1035	0,0023	0,422	-0,0285	1967,203
888	0,0022	0,268	-0,0484	1829,135	962	0,0022	0,552	-0,0255	3243,05	1036	0,0023	0,436	-0,0281	2053,177
889	0,0022	0,268	-0,0752	3652,592	963	0,0022	0,892	-0,0244	12692,86	1037	0,0023	0,442	-0,0281	2105,35
890	0,0022	0,27	-0,0689	2682,625	964	0,0023	0,266	-0,0489	1679,056	1038	0,0023	0,443	-0,0279	2096,356
891	0,0022	0,271	-0,0353	1359,706	965	0,0023	0,266	-0,0584	2005,738	1039	0,0023	0,447	-0,0279	2133,758
892	0,0022	0,271	-0,0534	2047,437	966	0,0023	0,266	-0,0608	2079,724	1040	0,0023	0,448	-0,0279	2140,211
893	0,0022	0,271	-0,0691	2720,145	967	0,0023	0,266	-0,0699	2410,672	1041	0,0023	0,46	-0,0277	2230,817
894	0,0022	0,272	-0,0376	1455,961	968	0,0023	0,266	-0,0773	2492,692	1042	0,0023	0,463	-0,0277	2258,444
895	0,0022	0,273	-0,0353	1371,266	969	0,0023	0,266	-0,0794	2004,663	1043	0,0023	0,467	-0,0276	2288,249
896	0,0022	0,273	-0,0356	1380,403	970	0,0023	0,267	-0,0502	1731,271	1044	0,0023	0,475	-0,0275	2354,1
897	0,0022	0,273	-0,0413	1602,345	971	0,0023	0,267	-0,0598	2057,852	1045	0,0023	0,48	-0,0274	2392,4
898	0,0022	0,275	-0,0361	1417,725	972	0,0023	0,267	-0,0789	3511,997	1046	0,0023	0,505	-0,0269	2591,52
899	0,0022	0,275	-0,0629	2465,242	973	0,0023	0,268	-0,0473	1635,362	1047	0,0023	0,533	-0,0266	2866,471
900	0,0022	0,276	-0,0427	1682,744	974	0,0023	0,268	-0,0715	2424,915	1048	0,0023	0,595	-0,0258	3289,092
901	0,0022	0,276	-0,0591	2328,789	975	0,0023	0,27	-0,0453	1584,667	1049	0,0023	0,624	-0,0259	4039,568
902	0,0022	0,276	-0,0636	2508,103	976	0,0023	0,27	-0,0532	1857,723	1050	0,0024	0,266	-0,046	1451,939

APÊNDICE D – Perfis para $\Delta A=1 \times 10^{-5}$ com $k=0,0045$

Condições:

- Erro admitido para $n(0)$ de $\pm 0,1\%$;
- $0,01 \leq A \leq 1$;
- $-0,08 \leq n'''(1) \leq -0,01$, com $\Delta n'''(1) = 1 \times 10^{-4}$;
- $\Delta z^* = 1 \times 10^{-4}$.

A	$n'''(1)$	$n(0)$	$n'(0)$	$n''(0)$	$n'''(0)$	$n'''(0)$ eq. (61a)
0,324	-0,0559	1,000488	-6,793483	107,9113	-2354,96	0,010761
0,324	-0,058	1,000496	-3,275867	2,503108	-9,075148	0,005189
0,324	-0,0582	1,000687	-3,083688	-0,24917	0,655568	0,004884
0,32405	-0,0579	1,000674	-3,380634	4,120358	-17,16312	0,005353
0,32406	-0,0575	1,000541	-3,838237	12,332	-80,91383	0,006078
0,32408	-0,0581	1,000303	-3,165824	0,882831	-2,682072	0,005012
0,3241	-0,058	1,000617	-3,271539	2,419528	-8,680026	0,005179
0,32412	-0,0579	0,999436	-3,345875	3,593626	-14,40125	0,005296
0,32413	-0,0569	0,999606	-4,659133	31,58429	-343,011	0,007375
0,32417	-0,0567	1,000133	-5,010643	41,45363	-524,1062	0,007929
0,32417	-0,0582	1,000467	-3,06756	-0,484549	1,222006	0,004854
0,32419	-0,058	1,000627	-3,265379	2,312962	-8,196773	0,005167
0,3242	-0,0573	0,999101	-4,046169	16,71867	-128,4117	0,006402
0,32422	-0,0571	1,000544	-4,36857	24,01277	-223,1226	0,006911
0,32422	-0,0574	0,999769	-3,930692	14,21871	-100,2212	0,006218
0,32427	-0,0552	0,999441	-8,938013	223,5791	-7338,597	0,014136
0,32427	-0,0566	1,00086	-5,204933	47,22655	-641,3543	0,008232
0,32427	-0,0581	1,000884	-3,16601	0,847551	-2,545173	0,005007
0,32428	-0,0577	1,000541	-3,580385	7,446833	-38,61111	0,005662
0,3243	-0,0581	0,999429	-3,131061	0,379709	-1,079039	0,004951
0,32431	-0,0565	1,000684	-5,38436	52,99746	-768,7487	0,008514
0,32431	-0,0579	0,999285	-3,32835	3,29266	-12,8261	0,00526
0,32443	-0,0573	0,999356	-4,032012	16,33649	-123,5201	0,006371
0,32447	-0,0576	1,00052	-3,681093	9,231937	-52,48154	0,00581
0,32447	-0,0577	0,999427	-3,537453	6,705265	-33,32002	0,005588
0,32449	-0,0581	1,000162	-3,134734	0,391765	-1,105904	0,004952
0,3245	-0,0579	0,999461	-3,3187	3,107741	-11,85998	0,005242
0,32456	-0,0578	0,999801	-3,428841	4,843419	-21,20208	0,005414
0,32456	-0,0582	0,999281	-3,016017	-1,195496	2,660145	0,004762
0,32457	-0,0577	1,000526	-3,557057	6,983929	-35,09229	0,005616
0,32459	-0,054	0,999382	-15,7895	849,5274	-57331,96	0,024927
0,32468	-0,0581	1,000416	-3,127637	0,263074	-0,723936	0,004935
0,32469	-0,0579	0,999932	-3,31607	3,024518	-11,39211	0,005232

A	$n'''(1)$	$n(0)$	$n'(0)$	$n''(0)$	$n'''(0)$	$n'''(0)$ eq. (61a)
0,3247	-0,0577	0,999589	-3,523515	6,416284	-31,1882	0,00556
0,32475	-0,0553	1,000344	-8,49556	195,3862	-5917,337	0,013399
0,32475	-0,0582	1,000092	-3,021485	-1,158574	2,567836	0,004766
0,32476	-0,0577	0,999851	-3,525333	6,42659	-31,19769	0,00556
0,3248	-0,0576	1,000762	-3,660297	8,772708	-48,45243	0,005772
0,3248	-0,0579	0,999403	-3,295682	2,708446	-9,912145	0,005197
0,32483	-0,0574	0,999310	-3,864365	12,7559	-84,56616	0,006092
0,32487	-0,0581	1,000282	-3,111882	0,023303	-0,057304	0,004905
0,32488	-0,0579	1,000683	-3,320075	3,036288	-11,36939	0,005233
0,32493	-0,0571	1,00038	-4,292429	21,99844	-193,317	0,00677
0,32494	-0,0569	1,000879	-4,610316	29,86095	-310,4845	0,007264
0,32494	-0,0582	1,000983	-3,028691	-1,100355	2,437411	0,004772
0,32495	-0,0573	1,000121	-4,00559	15,58985	-114,02	0,006311
0,32495	-0,0577	0,99971	-3,507093	6,085773	-28,8369	0,005525
0,32498	-0,0567	0,999815	-4,903805	38,0567	-454,9565	0,007724
0,32498	-0,0579	0,999646	-3,288484	2,564952	-9,217508	0,005179
0,32499	-0,0576	0,999966	-3,624624	8,125126	-43,3663	0,005709
0,32499	-0,0579	1,000157	-3,299772	2,722012	-9,903903	0,005197
0,32504	-0,0577	0,999046	-3,483741	5,698736	-26,35247	0,005486
0,32504	-0,0581	0,99952	-3,083393	-0,373164	0,944149	0,004855
0,32506	-0,0581	0,999921	-3,09119	-0,277095	0,710581	0,004867
0,32514	-0,0577	1,000034	-3,500441	5,926983	-27,6744	0,005509
0,32517	-0,0579	1,000476	-3,294364	2,603942	-9,322165	0,005184
0,32518	-0,0576	0,999757	-3,604082	7,730176	-40,28425	0,005671
0,32518	-0,0579	1,000833	-3,30202	2,70951	-9,780303	0,005195
0,32521	-0,0561	0,999425	-6,056306	76,7611	-1369,056	0,009527
0,32523	-0,0577	0,999612	-3,483107	5,634263	-25,80268	0,005479
0,32523	-0,0581	1,000732	-3,097975	-0,220637	0,566461	0,004873
0,32525	-0,0548	0,999453	-10,38922	321,7362	-12808,4	0,016339
0,32525	-0,0563	0,999172	-5,604857	60,29604	-936,781	0,008815
0,32525	-0,0581	0,999519	-3,069729	-0,583429	1,417564	0,004828
0,32529	-0,0578	0,999627	-3,370267	3,783655	-15,07159	0,005299
0,32533	-0,0577	1,000793	-3,504502	5,934013	-27,5527	0,005509
0,32534	-0,058	0,999184	-3,152339	0,536865	-1,52576	0,004955
0,32537	-0,0576	1,000031	-3,595847	7,536274	-38,6935	0,005651
0,32542	-0,0577	1,000472	-3,489697	5,680602	-25,92674	0,005483
0,32543	-0,0575	1,00061	-3,723852	9,829224	-56,71104	0,005851
0,32544	-0,0581	0,99924	-3,051122	-0,850035	1,96701	0,004793
0,32548	-0,0578	1,000693	-3,381811	3,903958	-15,57995	0,005312
0,32553	-0,058	1,000668	-3,173088	0,774226	-2,242947	0,004982
0,32554	-0,0554	0,99969	-7,939551	163,4974	-4461,341	0,012466
0,32556	-0,0576	1,000737	-3,598571	7,518677	-38,3515	0,005649
0,32558	-0,0578	0,999589	-3,348158	3,390406	-12,99476	0,005255

A	$n'''(1)$	$n(0)$	$n'(0)$	$n''(0)$	$n'''(0)$	$n'''(0)$ eq. (61a)
0,32562	-0,0575	1,000811	-3,713357	9,584618	-54,46244	0,005828
0,32562	-0,0581	0,999655	-3,048559	-0,912145	2,071881	0,004784
0,32563	-0,0581	0,999201	-3,037939	-1,046067	2,325859	0,004767
0,32566	-0,0553	0,999016	-8,218059	179,1553	-5148,298	0,012895
0,32572	-0,057	1,000357	-4,359544	23,37196	-210,4173	0,006838
0,32575	-0,058	0,999615	-3,134409	0,223658	-0,599021	0,004915
0,32576	-0,0567	0,999557	-4,805434	35,01797	-396,3292	0,007536
0,32581	-0,0571	1,00016	-4,200183	19,63942	-160,6576	0,006585
0,32581	-0,0581	1,000974	-3,065253	-0,735388	1,699508	0,004805
0,32582	-0,0572	1,000977	-4,083812	16,98988	-128,2546	0,006402
0,32582	-0,0581	0,999475	-3,031672	-1,154736	2,498244	0,004755
0,32584	-0,0579	0,99948	-3,224017	1,482232	-4,678162	0,005053
0,32587	-0,0571	0,999782	-4,183626	19,27973	-156,2005	0,006556
0,32601	-0,0581	1,000094	-3,032993	-1,169153	2,498119	0,004749
0,32606	-0,0578	0,9999825	-3,32274	2,910654	-10,56873	0,005202
0,32607	-0,0578	0,9990385	-3,29977	2,583204	-9,130562	0,005165
0,32608	-0,0563	0,9999155	-5,518542	56,76856	-843,8581	0,008638
0,32609	-0,0575	1,000062	-3,655752	8,469007	-45,26725	0,005722
0,32611	-0,058	1,00038	-3,127514	0,0673248	-0,170581	0,004894
0,32626	-0,0578	0,9996829	-3,301368	2,561858	-8,975042	0,005162
0,32638	-0,0577	0,9998444	-3,402247	4,106478	-16,4514	0,005316
0,32642	-0,0579	0,9990251	-3,173739	0,688818	-1,951569	0,004958
0,32645	-0,0578	1,000449	-3,305823	2,580666	-8,990745	0,005163
0,32648	-0,0571	1,000573	-4,148301	18,26515	-142,3181	0,006478
0,32648	-0,0577	0,9998605	-3,395261	3,978239	-15,74232	0,005302
0,3265	-0,058	0,9996848	-3,086222	-0,530404	1,258021	0,004819
0,32654	-0,0566	0,9990599	-4,870717	36,63242	-422,4687	0,007604
0,32658	-0,0572	0,9994637	-3,972794	14,55673	-100,7878	0,006201
0,3266	-0,0573	0,9991464	-3,833526	11,76232	-73,14209	0,005983
0,32662	-0,0576	0,9993667	-3,482167	5,383571	-23,69392	0,005434
0,32667	-0,0569	0,9996384	-4,391686	23,93855	-216,4371	0,006851
0,32671	-0,0576	0,9999922	-3,490692	5,487767	-24,23108	0,005444
0,32671	-0,058	1,00093	-3,100108	-0,391214	0,937652	0,004835
0,32673	-0,057	0,999588	-4,237471	20,2898	-167,348	0,006608
0,32674	-0,0559	1,000727	-6,342296	86,67611	-1629,96	0,009889
0,32679	-0,0577	1,000251	-3,381878	3,704536	-14,2213	0,005272
0,32689	-0,0567	1,000655	-4,714046	31,97793	-338,6044	0,007344
0,32689	-0,058	0,9998708	-3,064921	-0,864465	1,91075	0,004775
0,3269	-0,058	0,9995478	-3,057153	-0,962892	2,094376	0,004763
0,32692	-0,0565	1,000976	-5,065691	41,84923	-516,3509	0,007891
0,32696	-0,0577	1,000082	-3,365463	3,425077	-12,80219	0,005241
0,32698	-0,0577	0,9996548	-3,353855	3,253426	-11,99445	0,005222
0,327	-0,0579	1,000332	-3,164198	0,450775	-1,20958	0,004927

REFERÊNCIAS

- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.. *Análise numérica*: tradução da 8ª edição norte-americana. Cengage Learning Edições Ltda, São Paulo, 2008.
- BRADSHAW, P. (ed.). *Turbulence*. Springer-Verlag, Topics in Applied Physics Volume 12, Berlin, 1976.
- CHU, C. R.; JIRKA, G. H.. *Wind and Stream Flow-Induced Reaeration*. J. Environmental Engineering, Volume 129, nº 12, p. 1129-1136, 2003.
- ÇENGEL, Y. A.; GHAJAR, A. J.. *Transferência de Calor e Massa – uma abordagem prática*. Tradução de Fátima A. M. Lino do original Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications, 4th edition. AMGH Editora Ltda, 4ª Edição, Porto Alegre, 2012.
- DAVIDSON, P. A.. *Turbulence: an introduction for scientists and engineers*. Oxford, University Press Inc, 1ª Edição, New York, 2004.
- GONÇALVES, B. B.; SCHULZ, H. E.. One-dimensional turbulent mass transfer at air-water interfaces: details of discontinuities of derivatives using the RSW method. In: Brebbia, C. A. and Vorobieff, P. (Eds.), *Computational Methods in Multiphase Flow VII*. Wessex Institute of Technology, WIT Press, p. 365-376, 2013. doi: 10.2495/MPF130301
- GUIDORIZZI, H. L.. *Um Curso de Cálculo*. 2º volume, 5ª Edição, LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda, Rio de Janeiro, 2001.
- HERLINA, H.; JIRKA, G. H.. Experiments on gas transfer at the air-water interface induced by oscillating grid turbulence, *J. Fluid Mech.*, 594, p. 183-208, 2008.
- JANZEN, J. G.. *Fluxo de massa na interface ar-água em tanques de grades oscilantes e detalhes de escoamentos turbulentos isotrópicos*. Departamento de Hidráulica e saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2006. Tese de Doutorado, 170 p., São Carlos, 2006.
- JANZEN, J. G.; HERLINA, H.; JIRKA, G. H.; SCHULZ, H. E.; GULLIVER, J. S.. Estimation of mass transfer velocity based on measured turbulence parameters. *AIChE Journal*, Vol. 56, n. 8, p. 2005-2017, 2010.
- JANZEN, J. G.; SCHULZ, H. E.; JIRKA, G.. Turbulent gas flux measurements near the air-water interface in an oscillating-grid tank. In: Komori, S; McGillis, W.; Kurose, R. (Eds.), *Gas Transfer at Water Surfaces 2010*, Kyoto University Press, Kyoto, p. 65-77, 2011.
- KASNODZEI, P. E. A.; SOUZA, M. V. de; SCHULZ, H. E.. Ondas quadradas aleatórias: perfis de concentração média em transporte de massa unidimensionais em escoamentos turbulentos – equação governante de terceira ordem. *Anais do 21º Simpósio Internacional de Iniciação Científica da USP*. Trabalho 2258. São Carlos, 2013.
- KOMORI, S.; MCGILLIS, W.; KUROSE, R. (Eds.). *Gas Transfer at Water Surfaces 2010*, Kyoto University Press, Kyoto, 2011.

LOPES JÚNIOR, G. B.. *Organização de Equações Estatísticas para transferência de massa em processos turbulentos*. Departamento de Hidráulica e saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2012. Dissertação de Mestrado, 109 p., São Carlos, 2012.

LOPES JÚNIOR, G. B.; SCHULZ, H. E.. *Análise de condições de contorno para a quantificação da transferência de massa unidimensional em regime turbulento*. XXIV National Congress of Applied and Computational Mathematics, Brasil, p. 391-397, 2012.

LUCAS, K.. *Molecular Models for Fluids*. Cambridge University Press, 1ª Edição, New York, 2007.

MATHIEU, J.; SCOTT, J.. *An Introduction to Turbulent Flow*. Cambridge University Press, 1ª Edição, Cambridge, 2000.

MONIN, A. S.; YAGLOM, A. M.. *Statistical Fluid Mechanics: mechanics of turbulence*. Dover Edition - Dover Publications Inc. & MIT Press, republicação: MIT Press, Cambridge, 1975. Cambridge, 2007.

POPE, S. B.. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 1ª Edição, Cambridge, 2000.

PUITS, R.; RESAGK, C.; THESS, A.. Thermal boundary layers in turbulent Rayleigh-Bénard convection at aspect ratios between 1 and 9. *New Journal of Physics*. Vol. 15. IOP Publishing Ltd and Deutsche Physikalische Gesellschaft, 23 p., 2013.

RODI, W.; UHLMANN, H.. *Environmental Fluid Mechanics*. CRC Press, 1ª Edição, Alemanha, 2012.

SCHULZ, H. E.. Dependência do coeficiente de reoxigenação para com a difusividade molecular do oxigênio na água. *III Encontro Nacional de Ciências Térmicas (ENCIT 90)*, Volume II, p. 1067-1072, Itapema, 1990. (a)

SCHULZ, H. E.. Desenvolvimentos comparativos para a quantificação dos coeficientes de troca de massa em interfaces sólido-líquido e líquido-gás. *III Encontro Nacional de Ciências Térmicas (ENCIT 90)*, Volume II, p. 513-518, Itapema, 1990. (b)

SCHULZ, H. E.. *Investigação do mecanismo de reoxigenação da água em escoamento e sua correlação com o nível de turbulência junto à superfície*. Departamento de Hidráulica e saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 1985. Dissertação de Mestrado, 299 p., São Carlos, 1985.

SCHULZ, H. E.. *Investigação do mecanismo de reoxigenação da água em escoamento e sua correlação com o nível de turbulência junto à superfície*. Departamento de Hidráulica e saneamento, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 1989. Tese de Doutorado, 865 p., São Carlos, 1989. (a)

SCHULZ, H. E.. Modelos matemáticos para reoxigenação em canais de pequeno porte com base na teoria estatística da turbulência. *4º Simpósio Luso-Brasileiro de Hidráulica e Recursos Hídricos (SILUSB)*, 2º Volume, p. 619-631, Lisboa, 1989. (b)

SCHULZ, H. E.. *O Essencial em Fenômenos de Transporte*. Projeto Reenge, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2003.

SCHULZ, H. E.. Transferência de gases em superfícies líquidas altamente agitadas. *III Encontro Nacional de Ciências Térmicas (ENCIT 90)*, Volume II, p. 507-511, Itapema, 1990. (c)

SCHULZ, H. E.; JANZEN, J. G.. Concentration fields near air-water interfaces during interfacial mass-transport: oxygen transport and random square wave analysis. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, Volume 26, n. 3, p. 527-536, São Paulo, 2009.

SCHULZ, H. E.; LOPES JÚNIOR, G. B.; SIMÕES, A. L. A.; LOBOSCO, R. J.. One-dimensional turbulent transfer using random square waves – scalar/velocity and velocity/velocity interactions. In: *Hydrodynamics: Advanced Topics*, InTech, Rijeka, p. 3-34, 2011. (a)

SCHULZ, H. E.; SIMÕES, A. L. A.; JANZEN, J. G.. Statistical approximations in gas-liquid mass transfer. In: Komori, S; McGillis, W.; Kurose, R. (Eds.). *Gas Transfer at Water Surfaces 2010*, Kyoto University Press, Kyoto, p. 208-221, 2011. (b)

SCHULZ, H. E.; SIMÕES, A. L. A.; LOBOSCO, R. J.. *Hydrodynamics – natural water bodies*. 1ª Edição, Rijeka: InTech open acess, 1º Volume, 2012.

SCHULZ, H. E.; SCHULZ, S. A. G.. Modelling below-surface characteristics in water reaeration. *Water pollution, modeling, measuring, and prediction*, Computational Mechanics Publications and Elsevier Applied Science, p. 441-454, Southampton, 1991.

SISSON, L. E.; PITTS, D. R.. *Fenômenos de Transporte*. Editora Guanabara S.A., Rio de Janeiro, 1988.

SOUZA, M. V. de; KASNODZEI, P. E. A.; SCHULZ, H. E.. Estudo teórico-numérico de ondas quadradas aleatórias como ferramenta estatística para transporte em escoamentos turbulentos (Equação governante de segunda ordem). *Anais do 21º Simpósio Internacional de Iniciação Científica da USP*. Trabalho 1701. São Carlos, 2013.

STANIŠIĆ, M. M.. *The Mathematical Theory of Turbulence*. Springer-Verlag New York Inc., 1st Edition, New York, 1985.