

**CNEN/SP**

**ipen** Instituto de Pesquisas  
Energéticas e Nucleares

AUTARQUIA ASSOCIADA A UNIVERSIDADE  
DE SÃO PAULO

# **DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM ACIDENTES POSTULADOS EM REATORES NUCLEARES**

**ALMIR FERNANDES**

**Tese apresentada como parte dos  
requisitos para obtenção do Grau de  
Doutor em Ciências na Área de  
Reatores Nucleares de Potência e  
Tecnologia do Combustível Nuclear.**

**Orientador:  
Dr. José Rubens Maiorino**

**São Paulo  
1996**

**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES**  
**(IPEN/USP)**

**DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM ACIDENTES POSTULADOS**  
**EM REATORES NUCLEARES**

**ALMIR FERNANDES**

**Tese apresentada como parte dos requisitos para  
obtenção do grau de Doutor em Ciência na Área  
de Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia  
do Combustível Nuclear**

**Orientador:**

**Dr. José Rubens Maiorino**

**SÃO PAULO**

**1996**



## SUMÁRIO

	Página
<b>1. AEROSSÓIS - INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1 Aplicações de aerossóis	5
1.2 Aplicações da "mecânica de aerossóis" em engenharia de segurança nuclear	7
1.2.1 Produtos de fissão e comportamento do aerossol na contenção	10
1.2.2 Códigos de transporte de aerossóis na área nuclear	12
<b>2. EQUACIONAMENTO DO COMPORTAMENTO DOS AEROSSÓIS</b>	<b>20</b>
2.3 Mecânica dos Aerossóis	20
2.4 Modelagem da equação de dinâmica geral no código CONTAIN	29
2.5 Deposição e conservação de aerossóis	33
<b>3. DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM AMBIENTES TURBULENTOS</b>	<b>37</b>
3.1 Resultados Para Simulações Numéricas	51
3.2 Implementação do novo modelo no código CONTAIN 1.2	56
3.3 Conclusões	63
<b>4. DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS NA PRESENÇA DE GRADIENTES DE TEMPERATURA</b>	<b>64</b>
4.1 Análise de deposição termoforética	65
4.2 Resultados Para Simulação Numérica	76

4.3 Desenvolvimento de expressões aditivas e correlações	78
4.4 Discussões e sugestões para aplicação no código CONTAIN	92
<b>5. DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM AMBIENTES CONDENSADORES</b>	<b>96</b>
5.1 Equacionamento do Problema	100
5.2 Resultados Obtidos	117
5.3 Discussões e Conclusões	124
<b>4. CONCLUSÕES FINAIS</b>	<b>126</b>
Apêndice 1 - Nomenclatura e propriedades dos meios envolvidos	129
Apêndice 2 - Transformação de similaridade para o capítulo 4	135
Apêndice 3 - Velocidade e constante difusioforética	138
Apêndice 4 - Transformações de similaridade para o capítulo 5	146
<b>Bibliografia</b>	<b>160</b>

## LISTA DE TABELAS

	<b>Página</b>
3.1 Expressões para taxa de deposição total em geometrias simples	50
4.2 Condições de contorno para equações (4.23) e (4.24)	73
4.3 Correlações de transferência de calor	74
4.4 Velocidade de deposição de aerossóis normalizada, $\Delta T=1K$	77
4.5 Velocidade de deposição de aerossóis normalizada, $\Delta T=10K$	77
4.6 Velocidade de deposição de aerossóis normalizada, $\Delta T=40K$	78
4.7 Gradiente da concentração de partículas para vários Pr e Sc ( $K=0.0$ )	85
4.8 Velocidade de deposição média dos aerossóis, $\bar{v}_{dep}$ ; $\Delta T=50K$ ( $Pr=0.72$ )	88
4.9 Fluxos de energia e vapor calculados na interface	119
5.10 Velocidade normalizada de deposição dos aerossóis, $\Delta T=0.556 K$	120
5.11 Velocidade normalizada de deposição dos aerossóis, $\Delta T=2.222 K$	121
5.12 Velocidade normalizada de deposição dos aerossóis, $\Delta T=8.889 K$	122
5.13 Comparação da difusividade dos aerossóis	123
A.1 Expressão Difusioforética, $T=373K$	145
A.2 Comparação de Ordens de Grandeza em Condição de Contorno para $\zeta(0)$	159

## LISTA DE FIGURAS

	<b>Página</b>
3.1 Gráfico de $\frac{\partial}{\partial \theta} c(z, \theta)$ em função de $z$ e $\theta$	44
3.2 Deposição de aerossóis em um vaso cúbico	53
3.3 Espessura da camada limite	54
3.4 Deposição de aerossóis em um vaso esférico	55
3.5 Deposição de aerossóis em um vaso cilíndrico, eixo na horizontal	55
3.6 Distribuição inicial de aerossóis, $t=0$	58
3.7 Distribuição de aerossóis em um vaso cúbico; apenas deposição, $t=3600$ s	59
3.8 Distribuição de aerossóis em um vaso cúbico; apenas deposição, $t=7200$ s	59
3.9 Distribuição de aerossóis em um vaso esférico; apenas deposição, $t=3600$ s	60
3.10 Distribuição de aerossóis em um vaso esférico; apenas deposição, $t=7200$ s	61
3.11 Distribuição de aerossóis em um vaso esférico; coagulação e deposição, $t=3600$ s	61
3.12 Distribuição de aerossóis em um vaso esférico; coagulação e deposição, $t=3600$ s	62
3.13 Distribuição de aerossóis em um vaso esférico; coagulação e deposição	62
4.14 Camadas limites	66
4.15 $\zeta(\eta)$ , $Pr=0.72$	71
4.16 $\theta(\eta)$ , $Pr=0.72$	72

4.17	Concentração de aerossóis na parede, $\Delta T=1K$	83
4.18	Concentração de aerossóis na parede, $\Delta T=50K$	84
4.19	Velocidade de deposição para $\Delta T=50K$	89
4.20	Distribuição dos aerossóis no interior da contenção	92
5.21	Camadas limite	97
5.22	Volumes de controle na interface	110
5.23	Deposição de aerossóis	124

Este trabalho é dedicado à minha esposa,  
Anabel Gomes Fernandes, que compreendeu,  
me apoiou e acompanhou em todos os momentos.

## Agradecimentos

Gostaria de agradecer às inúmeras pessoas e instituições que, de uma forma ou de outra, contribuíram para que este trabalho fosse realizado.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio durante o estágio em Columbia, Missouri (Estados Unidos), bem como pelo auxílio quando do meu retorno ao Brasil.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP), pelo fornecimento das instalações e do curso de Pós-Graduação.

À Universidade do Missouri, Columbia, particularmente ao Departamento de Energia Nuclear e ao *Particulate System Research Center*, por todo o auxílio durante minha estada em Columbia.

À Escola Técnica Federal de São Paulo, seu corpo administrativo e professores, pela compreensão e visão da necessidade do apoio à formação de seus profissionais.

Ao Doutor José Rubens Maiorino, meu orientador, que me incentivou desde o primeiro momento em minha pós-graduação.

Ao Doutor Sudarshan K. Loyalka, meu *advisor* durante minha estada de dois anos em Columbia para o desenvolvimento de parte deste trabalho, pela dedicação e estímulo.

Aos Professores Aquilino Senra Martinez (COPPE-UFRJ), Paulo Artaxo (IFUSP), Eduardo L.L. Cabral (EPUSP, IPEN) e Roberto D.M. Garcia (IEAv-CTA, IPEN) pela participação na banca de doutorado e pelas sugestões apresentadas que enriquecem este trabalho como um todo.

A todos enfim, que direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho e cujos nomes injustamente omito.

# DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM ACIDENTES POSTULADOS EM REATORES NUCLEARES

Almir Fernandes

## RESUMO

Após um acidente em um reator nuclear a contenção pode ser preenchida com aerossóis, gases não condensáveis e vapor. Os aerossóis serão responsáveis por boa parte do termo fonte eventualmente liberado para o meio ambiente. A fenomenologia a que os aerossóis estão sujeitos é bastante complexa e extensa. Este trabalho se propõe a discutir e aprimorar onde possível os modelos atualmente existentes para análise da deposição dos aerossóis, tanto em ambientes turbulentos, quanto em ambientes laminares. Neste último caso, é considerada a influência de gradientes de temperatura e concentração de vapor e gases não condensáveis, situações típicas que podem ocorrer durante uma sequência acidental com derretimento do núcleo. São apresentados desenvolvimentos teóricos e novas correlações úteis para aplicação em códigos computacionais de segurança nuclear.

# AEROSOL DEPOSITION IN POSTULATED ACCIDENTS IN NUCLEAR REACTORS

**Almir Fernandes**

## ***ABSTRACT***

*Following an accident in a nuclear reactor, the containment may be filled with aerosols, vapor and non condensable gases. The aerosols will be directly related to the source term delivered to the environment. The aerosol phenomenology is very complex and vast. This thesis is going to discuss and enhance, where appropriate, the aerosol deposition modeling at once available. The discussion will consider both, the turbulent and laminar limits, taking into account the temperature and vapor/non condensable gases gradients in the environment. This is a typical scenario that may result from one hypothetical meltdown accident. Theoretical development and new correlations, useful for implementation in the nuclear reactor source term codes, are provided.*

## 1. AEROSSÓIS - INTRODUÇÃO

Na atmosfera, cada  $\text{cm}^3$  de ar contém aproximadamente  $2.59 \cdot 10^{19}$  moléculas, com diâmetro em torno de  $3 \text{ \AA}$ . Neste meio, deverão haver entre  $10^3$  (ar puro) e  $10^5$  (ar poluído) partículas consideravelmente maiores, com diâmetro entre  $0,001$  e  $50 \mu\text{m}$ . Vale ressaltar que um ambiente muito poluído pode conter ainda mais partículas na faixa acima, destacando-se em geral bactérias, pólen, poeira e emissões industriais. Estas partículas podem ser benéficas ou não aos seres vivos e surgem de um grande número de fontes naturais, bem como da atuação das diversas espécies que habitam o nosso planeta. A composição química e a morfologia destas partículas pode ser bem variada, e algumas podem ser tóxicas ou radioativas [1].

A este sistema de partículas dispersas em um gás dá-se comumente o nome de aerossol. De forma geral, o comportamento destas pequenas partículas será afetado pelo comportamento do meio em que elas se encontram (pressão, temperatura, etc.), em contraposição às partículas maiores que se movem neste mesmo meio praticamente sem tomar conhecimento de eventuais variações.

Para partículas de uma dada composição, os principais parâmetros de interesse são tamanho e forma. Estes parâmetros afetam o transporte de massa e energia para as partículas e ainda a interação destas com a radiação.

Historicamente é difícil traçar a evolução dos estudos relacionados com os aerossóis. Possivelmente Stokes tenha sido o primeiro a contribuir de forma significativa para o entendimento da dinâmica destas pequenas partículas por meio de trabalhos

realizados em 1845 e 1851 [2, 3]. Nestes trabalhos [1], Stokes utiliza a teoria hidrodinâmica para derivar a fórmula para o arraste friccional do meio sobre as partículas:

$$F_d = 3 \pi \mu d_p v_{\text{stokes}} \quad (1.1)$$

Os termos desta e das demais equações desta tese encontram-se definidos no primeiro apêndice. Igualando as forças sobre a partícula (basicamente arraste e gravidade, já que o empuxo pode ser ignorado assumindo que a densidade da partícula seja muito maior que a densidade do ar), pode-se calcular a velocidade limite com que estas pequenas partículas devem se depositar:

$$v_{\text{stokes}} = \frac{d_p^2 \rho_p g}{18 \mu} \quad (1.2)$$

Esta formulação apresentada por Stokes é válida quando as partículas são grandes comparadas com o livre caminho médio das moléculas que compõe o meio, ou seja, não é válida no limite de pequenas partículas (também conhecido como limite de moléculas livres, em contraposição ao limite de deslizamento para grandes partículas). Vários autores corrigiram esta expressão com o objetivo de aplicá-la a toda a extensão de tamanho de partículas de interesse. Em particular, trabalhos importantes neste sentido foram realizados por Cunningham [4] e Milikan [5]. Smoluchowski [6, 7] contribuiu para o estudo de coagulação entre as partículas.

Albert Einstein também apresentou notável contribuição para o entendimento dos aerossóis com seus estudos sobre o movimento browniano [8]. Movimento browniano é o nome dado ao movimento irregular de pequenas partículas suspensas em um fluido devido aos impactos aleatórios das moléculas do fluido sobre as partículas. Estes impactos ocorrem devido ao movimento térmico das moléculas. Segundo Einstein [8] e

Chandrasekhar [9], a agitação Browniana das partículas resultará em um movimento difusivo destas partículas no meio, o qual pode ser descrito pela equação de difusão:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) \quad , \quad (1.3)$$

onde  $\phi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$  representa o número de partículas em  $d\mathbf{r}$  na posição  $\mathbf{r}$  no instante  $t$ , considerando que um certo número de partículas tenha sido posicionado na origem em  $t=0$  (vide referência [1]). Nesta equação ainda, o “coeficiente de difusão” pode ser expresso por [8]:

$$D = B k_B T \quad , \quad (1.4)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $B$  é conhecido como “mobilidade” da partícula, ou seja, a velocidade por unidade de força.

Por outro lado, problemas com poluição do ar são mais antigos do que imagina-se a princípio. Em 1272 o Rei Edward I da Inglaterra tentou limpar o esfumaçado céu de Londres banindo o uso de carvão marítimo (*sea coal*) [10]. Ainda durante os séculos XIV e XV, dois reis ingleses (Richard II e Henry V) regularam e restringiram a utilização de carvão em Londres [11]. A utilização posterior do carvão para geração de energia foi a mola mestra da revolução industrial. Infelizmente, esta forma de geração deixou um legado muito grande de degradação ambiental, que persiste e se agrava em todo o mundo atualmente (efeito estufa).

Por volta de 1895, a primeira legislação específica sobre controle de poluição automotiva surge nos Estados Unidos [10], estabelecendo que: “é ilegal a liberação de vapor visível dos escapamentos dos automóveis”.

Já neste século, em várias ocasiões houve um forte relacionamento entre poluição do ar e mortes. Na Bélgica, em 1930, uma região altamente industrializada observou uma densa neblina por 3 dias consecutivos. Ao final deste período, 60 pessoas haviam morrido, cerca de 10 vezes o valor médio de óbitos para o período. Em 1931, na Inglaterra, 592 pessoas morreram após 9 dias de intensa neblina. Em 1948 nos Estados Unidos, após 4 dias de intensa neblina em uma cidade da Pennsylvania, mais da metade da população de 14000 habitantes ficaram seriamente doentes, resultando em 20 mortes. Dez anos mais tarde, um estudo mostrou que a expectativa de vida das pessoas que haviam ficado severamente adoecidas no episódio de 1948 havia sido reduzida drasticamente [10]. Outras situações de neblina intensa em cidades altamente industrializadas levaram à morte milhares de pessoas neste século. No Brasil, grande destaque foi dado nos anos 70 para a poluição de fábricas de cimento e posteriormente para o problema crítico da cidade de Cubatão.

Apesar de todas estes acontecimentos remontarem a séculos, e mesmo os estudos teóricos terem se iniciado a cerca de 150 anos atrás, foi apenas em 1955 que surgiu o primeiro livro em que boa parte da fenomenologia dos aerossóis é abordada em uma única obra. Fuchs [12] integrou pela primeira vez um conhecimento que se encontrava disperso em diversos jornais e revistas de uma grande variedade de áreas científicas e tecnológicas. Além desta contribuição fundamental, Fuchs forjou a denominação pela qual este conhecimento disperso passou a ser conhecido: “mecânica de aerossóis”. Este livro, originalmente escrito em russo, foi traduzido para o inglês em 1960.

Em 1966 Davies editou um livro [13] que reuniu os avanços no conhecimento e aplicação de aerossóis e é um importante livro de referência até hoje. Friedlander apresentou também um importante trabalho sobre os fundamentos dos aerossóis em 1977 [14]. Em 1983 Loyalka [15] realizou uma importante revisão sobre mecânica de aerossóis, particularmente com aplicações na área de segurança nuclear. Atualmente, seria muito difícil enumerar todos os livros que tratam direta ou indiretamente deste assunto, mas o

trabalho de Williams e Loyalka [1] deve ser destacado por representar uma referência atualizada (1991) e com uma profunda análise do direcionamento atual dos estudos envolvendo os aerossóis.

## 1.1 Aplicações de aerossóis

Dentre as áreas em que a “mecânica de aerossóis” é relevante na análise e modelagem, destacam-se [1]:

a) Segurança de reatores nucleares: a compreensão da evolução e do transporte de aerossóis é extremamente importante na estimativa e controle da radioatividade liberada de acidentes postulados e reais em reatores nucleares. Em particular, acidentes com derretimento parcial ou total do núcleo, rompimento de núcleos de reatores rápidos e a sabotagem de cascos de transporte de combustível são potenciais fontes de liberação de aerossóis radioativos para o meio ambiente.

b) Inverno nuclear: previsões diversas levam a crer que uma guerra nuclear liberaria grandes quantidades de partículas na atmosfera. Diversos fenômenos ocorrendo com estas partículas (que se comportam como aerossóis) não são ainda totalmente conhecidos, o que leva a uma pobre previsão das conseqüências climáticas globais de tal catástrofe.

c) Ciências atmosféricas: a formação de névoa e nuvens por nucleação<sup>1</sup>, coagulação<sup>2</sup> e condensação<sup>3</sup>, expulsão de partículas pela chuva e neve, modificações

---

<sup>1</sup> nucleação: formação de núcleos a partir dos quais pode se desenvolver a condensação de vapor e o crescimento das partículas

<sup>2</sup> coagulação ou aglomeração: processo de adesão de partículas quando estas colidem

<sup>3</sup> condensação: processo de crescimento das partículas por condensação de vapor sobre a mesma

climáticas e diminuição da camada de ozônio dependem fortemente dos processos de geração e transporte de aerossóis.

d) Combustão: veículos, plantas químicas e fósseis emitem grandes quantidades de partículas. Estas partículas são formadas por fragmentação<sup>†</sup> e/ou vaporização e a subsequente nucleação homogênea/heterogênea e aglomeração dos constituintes do combustível. Esta liberação pode levar à ocorrência local e/ou global de chuvas ácidas, neblina e fumaça que afetam o meio ambiente e causam doenças respiratórias.

e) Manufatura de materiais: um reator de aerossóis é um sistema gasoso no qual partículas minúsculas são formadas por uma reação química. Recentemente [16] tais reatores tem sido utilizados para a fabricação de fibras óticas, materiais cerâmicos e de silício, catalisadores, etc.

f) Controle de contaminação por partículas: a manufatura de circuitos integrados para a microeletrônica e a expectativa de crescimento de indústrias de manufatura de micromáquinas, as quais necessitam de um rigoroso controle de contaminação por partículas submicrométricas, faz prever um crescente interesse industrial no entendimento do transporte de tais partículas em uma variedade de condições.

g) Interação das partículas com radiação [17]: estudos recentes tem relacionado interações de partículas de aerossol com a radiação atmosférica resultando na atenuação do efeito estufa.

h) Outras áreas [18]: higiene e saúde pública, engenharia mecânica, elétrica, civil, aeronáutica e química, além de diversos campos de física e matemática (teoria cinética, física dos fluidos, eletromagnetismo, eletrostática, físico-química, fluidos de baixa viscosidade, escoamento em singularidades, baixo número de Reynolds, arraste, etc.).

---

<sup>†</sup> fragmentação: quebra de partículas maiores originando partículas menores

Dentre as diversas aplicações citadas acima, particular interesse para o desenvolvimento desta tese tem a deposição de aerossóis em situações hipotéticas de acidentes com derretimento do núcleo de reatores nucleares. Caso ocorra tal acidente, há a possibilidade de liberação de produtos de fissão para o ambiente da contenção, na qual grande parte dos produtos de fissão terá comportamento típico de aerossóis. Dentre as conseqüências possíveis deste cenário, o mais severo é uma eventual ruptura do edifício de contenção que ocasionará a liberação de produtos de fissão para o ambiente externo. Desta forma, a determinação do termo fonte externo dependerá da deposição destes aerossóis na contenção, e portanto do conhecimento de sua distribuição na contenção.

## **1.2 Aplicações da “mecânica de aerossóis” em engenharia de segurança nuclear**

Diversos eventos podem levar a um acidente em um reator nuclear. Para prevenir que tais eventos iniciadores se propaguem e realmente causem algum dano ao reator, ou até mesmo ao meio ambiente, diversos sistemas de segurança são projetados. Para que um reator obtenha licença de operação, os projetistas e as concessionárias de energia devem demonstrar que a planta responde bem a todo tipo de falha simples que se possa imaginar. Estes são os denominados "Acidentes Básicos de Projeto". Assume-se que nenhum acidente desta categoria possa levar ao derretimento do núcleo, pois imaginava-se (até o final da década de 70) que se o núcleo do reator chegasse a derreter, o acidente não seria controlável e as conseqüências seriam catastróficas.

Em 1975 a *United States Nuclear Regulatory Commission* (US NRC) liberou um estudo probabilístico de risco em centrais nucleares, o documento WASH-1400 [19]. Este documento colocava que os maiores riscos de derretimento do núcleo não eram decorrentes de um acidente de perda de refrigerante primário por grande ruptura (*large LOCA*), mas sim de falhas menores que pudessem ocorrer de forma simultânea, como por exemplo, uma pequena ruptura (*small LOCA*) simultânea com perda de energia elétrica. Em 1979 ocorreu

o acidente na usina de Three Mile Island, EUA. Neste acidente, iniciado por uma perda de vazão no secundário, seguido por uma pequena ruptura (caracterizada pela abertura da válvula de alívio do pressurizador e o seu não fechamento) e finalmente por uma intervenção equivocada dos operadores da planta (desligar o Sistema de Injeção de Emergência), houve o derretimento de boa parte do núcleo do reator, com a liberação de produtos de fissão sob a forma de aerossóis para o ambiente da contenção. O que se observou, no entanto, foi que o acidente pôde ser gerenciado (com a volta da injeção de água do Sistema de Injeção de Emergência, o vaso de pressão não rompeu, mantendo praticamente todo o material derretido no seu interior). A liberação para fora da contenção foi mínima, se restringindo basicamente aos gases nobres [1].

Com a ocorrência deste acidente, muitos estudos passaram a ser realizados sobre sequências acidentais que possam levar ao derretimento do núcleo. Devido às graves consequências ao reator e mesmo ambientais que podem resultar destas sequências, elas passaram a ser denominadas de "acidentes severos". Estes estudos realizaram-se tanto para prever o comportamento de centrais nucleares às falhas múltiplas [20, 21], quanto para o desenvolvimento de novas técnicas e metodologias de análise [22]. A física envolvida na análise completa destas sequências é muito extensa, abrangendo estudos de termohidráulica (do sistema primário e da contenção), derretimento e relocação do núcleo, liberação dos produtos de fissão das varetas de combustível, transporte destes produtos de fissão no sistema primário (em um meio líquido ou bifásico), interação do combustível derretido com os elementos estruturais, análise de tensão e deformação do vaso (até o seu eventual rompimento pelo aquecimento devido ao contato com o núcleo derretido), aquecimento da contenção pelos fragmentos derretidos, pressurização e eventual rompimento da contenção, interação do núcleo derretido com o concreto da contenção, transporte dos produtos de fissão na contenção, entre outros. Muitos códigos computacionais que realizam análises detalhadas de parte desta física (SCDAP/RELAP [23], CONTAIN [24], NAUA [25], MARCH [26], TRAP-MELT [27], VANESA [28], etc.) ou de toda a física de forma integrada e simplificada (STCP [29], MELCOR [30], XSOR [31], MAAP [32], ESCADRE

[33]) foram desenvolvidos. Estes códigos procuram dar suporte às Análises Probabilísticas de Segurança (códigos integrados) ou analisam de forma determinística os acidentes para, eventualmente, servir de padrão (*benchmark*) para avaliar os códigos simplificados e evoluir um dia para tornar os cálculos de acidentes severos possíveis de serem realizados em suporte ao licenciamento de uma central nuclear.

Análises Probabilísticas de Segurança (APS) representam uma forma sistemática de analisar a segurança de uma central nuclear [34], sendo o resultado direto dos estudos iniciais dos anos 70 e 80 [19 e 20]. A experiência na operação de uma usina, neste caso, é de grande importância para a análise. De forma geral, as APS se dividem em três níveis [34]:

- APS nível 1: fornece uma avaliação do projeto e operação de uma planta nuclear, com especial ênfase nas seqüências que podem levar a danos ao núcleo. Esta etapa pode fornecer fraquezas e pontos fortes de uma central no que diz respeito à segurança. Pode também clarear formas de prevenir acidentes com derretimento do núcleo, que podem levar a grandes liberações radioativas.

- APS nível 2: nesta etapa devem ser analisadas as conseqüências da eventual seqüência acidental com derretimento do núcleo, como a conseqüente carga sobre a contenção e o transporte de material radioativo para o meio ambiente. Esta análise deverá fornecer informações sobre a probabilidade de tais liberações ocorrerem, bem como a importância relativa dos eventos envolvidos. Assim, formas de controle e gerenciamento de acidentes podem ser desenvolvidas. Nesta etapa são utilizados os códigos simplificados de análise de acidentes severos.

- PSA nível 3: neste nível é analisada a dispersão de radionuclídeos no meio ambiente externo à usina, com os potenciais efeitos à saúde humana.

Das diversas áreas de pesquisa em acidentes severos, particular interesse adquire o estudo da fenomenologia envolvendo a geração e o transporte dos produtos de fissão sob a forma de aerossóis na contenção. O interesse nesta área decorre do fato de a liberação final para o meio ambiente (termo fonte) ser fortemente afetada por processos típicos do comportamento dos aerossóis em vasos de pressão e contenções. Tais processos tendem a reduzir a liberação para o meio ambiente por meio de aglomeração, condensação e deposição dos aerossóis na contenção [1].

Ao analisar os fenômenos que se desenvolvem na contenção nuclear durante uma seqüência acidental severa, deve-se tomar o cuidado de diferenciar os aerossóis e os fragmentos derretidos do núcleo (*debris*). Enquanto os fragmentos se movem em um meio gasoso sem ser grandemente afetado por este, o transporte do aerossol é afetado pela velocidade do gás. Os fragmentos “caem” rapidamente através do gás, enquanto que o aerossol permanece suspenso neste. Os limites entre estas grandezas gira em torno dos 30  $\mu\text{m}$  para o diâmetro equivalente aerodinâmico [35]. A massa total suspensa, as distribuições de tamanho e composição e ainda os fatores de forma do aerossol no ambiente da contenção em função do tempo são as variáveis mais importantes na modelagem da liberação de radioatividade na contenção [36]. As maiores incertezas na modelagem destas grandezas encontra-se no termo fonte dos aerossóis [37, 38].

### **1.2.1 Produtos de fissão e comportamento do aerossol na contenção**

Processos naturais no prédio da contenção terão grande importância na retenção de boa parte dos produtos de fissão liberados do circuito primário durante um acidente severo. Efeitos importantes incluem uma grande variedade de reações químicas, aglomeração e deposição de aerossol, e ainda a condensação de vapor nas partículas componentes do aerossol. Além disso, mudanças nas condições termoidráulicas do sistema podem resultar na resuspensão e liberação de alguma porção dos produtos de fissão já depositados.

A modelagem de acidentes severos baseia-se no fato de que o transporte dos produtos de fissão na contenção pode ser descrito em termos de processos de aglomeração e deposição de aerossóis. Entretanto, há incertezas na definição da magnitude e das formas físico-químicas precisas dos produtos de fissão liberados para a contenção a partir do sistema primário, o que dificulta uma acurada quantificação de qualquer subsequente emissão para o meio ambiente. Muitas informações são requeridas para descrever importantes fenômenos tais como a interação entre os produtos de fissão gasosos e aerossóis gerados a partir dos componentes do núcleo do reator. Além disso, como os materiais do núcleo são transportados das condições de alta temperatura e pressão do circuito primário para o ambiente de baixa temperatura e pressão da contenção, pode ocorrer a resuspensão dos aerossóis já depositados. Estes fenômenos devem ser estudados para determinar seu efeito nas formas químicas e quantidades de produtos de fissão liberados para o meio ambiente. Assim, estudos extensos têm sido realizados para determinar importantes aspectos do comportamento dos produtos de fissão e do aerossol durante acidentes severos em reatores refrigerados a água.

Diversos programas experimentais (ACE [39], LACE [40], MARVIKEN [41], SASCHA/DEMONA [42], PITEAS/FUCHIA [43], ECOTRA [44] e outros [45]) foram desenvolvidos com o objetivo de analisar os processos físico-químicos específicos e importantes na contenção e determinar seus efeitos no transporte dos produtos de fissão gasosos e aerossolizados.

Produtos de fissão contidos no aerossol podem ser convertidos em espécies gasosas quando este material é transportado do sistema primário para a contenção. Os programas de pesquisa têm sido baseados nos estudos destes efeitos, acoplados com as necessidades de definir as características físicas e químicas do aerossol emitido do circuito primário. Assim, trabalhos teóricos e experimentais em uma grande variedade de fenômenos tem sido desenvolvidos [45]:

(a) nucleação de aerossol;

(b) processos de transporte de vapor;

(c) interação de produtos de fissão gasosos com aerossóis gerados pelos principais componentes do núcleo do reator;

(d) resuspensão causada pelas alterações na velocidade e temperatura do gás.

Outros temas que têm recebido muita atenção se referem ao estudo do comportamento do Iodo e seus derivados na contenção [46] e também o estudo do aquecimento direto da contenção [47], fenômeno atualmente apenas abordado pelo código CONTAIN [24].

## 1.2.2 Códigos de transporte de aerossóis na área nuclear

Há dois campos de aplicação de teoria de transporte de aerossóis na área nuclear: transporte no sistema primário e transporte na contenção. Na primeira categoria se enquadram os códigos TRAP-MELT [27], VICTORIA [48] e AEROSOLS [33]. Na segunda categoria, de maior interesse para este trabalho, se enquadram os códigos CONTAIN [24], NAUA [25], PARADISEKO [49], AEROSOLS/B2 [33], AEROSIM [50], REMOVAL [51], entre outros. Os códigos MELCOR [30] e MAAP [32] apresentam análises integrais (tanto no sistema primário quanto na contenção), ao passo que os outros códigos "integrais" são na verdade agrupamentos de códigos isolados (STCP [29]: TRAP-MELT e NAUA; ESCADRE [33]: AEROSOLS e AEROSOLS/B2) ou formulações simples, sem análise do transporte de aerossóis (XSOR [31]). Alguns destes códigos são brevemente descritos no final deste capítulo.

Diversos trabalhos apresentando estudos comparativos entre os códigos foram publicados [52, 53, 54]. As conclusões gerais são de que os códigos têm utilizado os mesmos esquemas numéricos de solução, ou seja, o método seccional é utilizado para discretizar o volume das partículas, e a equação integro-diferencial de conservação dos aerossóis é transformada em um conjunto acoplado de equações diferenciais de primeira ordem. A solução destas equações é obtida por meio da aplicação de técnicas de diferenças finitas ou de elementos finitos. Como alguns destes códigos foram desenvolvidos para aplicações em reatores refrigerados por metal líquido, as maiores discrepâncias encontradas nos resultados se referem a fenômenos muitas vezes não modelados por alguns dos códigos [52]. Em geral, a principal ressalva apresentada a estes códigos se refere ao acoplamento com a termoidráulica da contenção. Dos códigos mencionados acima, apenas o CONTAIN [24] e o MELCOR [30] apresentam um estudo detalhado da fenomenologia dos aerossóis (através do modelo MAEROS [55]) acoplada à termoidráulica da contenção.

A seguir, alguns dos principais códigos computacionais utilizados para a simulação de acidentes severos são descritos. Em todos estes códigos há uma modelagem do comportamento dos aerossóis na contenção. Para uma discussão detalhada destes e outros códigos veja as referências [1] e [15].

#### **NAUA** (*NAchUnfall Atmosphere* - atmosfera após acidente)

NAUA-Mod4 [25] é um código computacional desenvolvido na Alemanha para tratar o comportamento dos aerossóis em contenções fechadas contendo uma atmosfera com vapor condensado. É utilizado para aplicações no campo de transporte e deposição de produtos de fissão durante acidentes com derretimento do núcleo em reatores a água leve pressurizados.

O código NAUA realiza apenas a descrição do comportamento do aerossol, sem considerar a termoidráulica da contenção, os termos fontes para aerossol/vapor e ainda as

fugas (ruptura ou ventilação da contenção, por exemplo), as quais são funções externas e que devem ser adicionadas por meio da entrada de dados do código. Isto implica em que não haja mecanismos de realimentação entre os processos envolvendo o aerossol e a termoidráulica da contenção. O código trata multicompartimentos apenas por meio de execuções consecutivas (cada execução admite apenas um compartimento). O código calcula apenas processos físicos, desconsiderando os efeitos químicos no comportamento dos produtos de fissão. O pacote de programas STCP [29] (*Source Term Code Package*), contém uma versão modificada do código NAUA-mod<sup>5</sup>. Estas modificações foram realizadas nos Estados Unidos com três objetivos principais:

i) incluir o mecanismo de remoção de aerossol por meio do aspersor (*spray*) da contenção:

ii) acoplar com os códigos ICEDF e SPARC para calcular os efeitos da piscina de supressão e do condensador na atenuação de aerossóis na contenção (a piscina e o condensador fazem parte dos sistemas de emergência da contenção);

iii) interligar o código NAUA com os demais códigos componentes do STCP.

As críticas [56] levantadas contra códigos de análise da contenção como os componentes do STCP (MARCH, VANESA e NAUA) concentram-se no fato destes não analisarem simultaneamente todos os fenômenos que ocorrem na contenção (termodinâmica e termoidráulica multifase, física do aerossol, transporte dos produtos de fissão, interações núcleo/concreto, formação e combustão de gases inflamáveis e o desempenho dos sistemas de engenharia de segurança) e que apresentam importantes processos de realimentação. Esta análise segmentada faz com que as dificuldades

---

<sup>5</sup> esta versão modificada está disponível no Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, juntamente com os demais componentes do STCP, apresentando no entanto problemas para sua execução

eventuais encontradas na análise de resultados seja reportada à “interface com códigos de análise termoidráulica da contenção” [57].

### **MAAP (Modular Accident Analysis Program)**

O código MAAP [32] foi desenvolvido pela Fauske & Associates Inc., e possui modelos modulares, totalmente integrados (termodinâmica do sistema primário; aquecimento, degradação e derretimento do núcleo; liberação, transporte e deposição dos produtos de fissão; modelagem dos sistemas de engenharia de segurança; termodinâmica da contenção). O código analisa um grande número de fenômenos interrelacionados, os quais são modelados a partir de primeiro-princípios, modelos fenomenológicos simples confrontados com experimentos e conservação de massa/energia, apresentando solução acurada e consistente com modelos básicos e dados experimentais. O acoplamento dos modelos permite realimentação dos fenômenos, e o código apresenta flexibilidade para permitir a interação do usuário em qualquer momento, tem execução rápida e é transportável (Vax, PC, IBM, CRAY, Workstation, etc.).

Neste código, o tratamento de aerossóis é realizado por meio de interpolações de situações extremas, tais como aerossol estacionário e em equilíbrio com uma fonte e aerossol em decaimento sem fonte, as quais são solucionadas analiticamente. Das soluções exatas surgem correlações que simulam coagulação, condensação, remoção (sedimentação gravitacional<sup>6</sup>, termoforese<sup>7</sup> ou impactação inercial<sup>8</sup>) e fuga. Apenas dois mecanismos de remoção e coagulação podem ser considerados para cada execução [32, 57]. Os resultados têm se mostrado satisfatórios quando comparados com outros métodos de solução, como

---

<sup>6</sup> sedimentação gravitacional: deposição das partículas devido à ação gravitacional

<sup>7</sup> termoforese: movimento das partículas de aerossóis devido à presença de gradientes de temperatura no meio

<sup>8</sup> impactação inercial: em geral, as partículas tendem a seguir a linha de fluxo do fluido. Entretanto, partículas grandes ou na presença de um fluido em alta velocidade podem seguir em linha reta e colidir com algum obstáculo. Este fenômeno é conhecido por impactação inercial.

por exemplo o método seccional do código CONTAIN [32, 58], cuja execução é muito mais demorada.

## CONTAIN

O código CONTAIN 1.2 [24] é uma ferramenta de análise integrada da contenção nuclear, utilizada para prever as condições físicas, químicas e radiológicas dentro do edifício da contenção após a liberação de material radioativo do sistema primário em um acidente severo. Além disso, o código também pode fornecer o termo fonte para o meio ambiente.

O código trata interações entre fenômenos termoidráulicos, comportamento de aerossol e dos produtos de fissão, sendo aplicável tanto a reatores refrigerados a água leve quanto a reatores refrigerados por metal líquido. O código inclui modelos atmosféricos para termodinâmica ar/vapor, fluxo intercelular, combustão de gases, evaporação e condensação sobre estruturas e também sobre aerossóis, além da análise do comportamento de aerossol. Inclui ainda modelos para reações na cavidade do reator como por exemplo interação do núcleo com o concreto e evaporação de água.

Os fenômenos de condução de calor nas estruturas, decaimento e transporte de produtos de fissão, aquecimento radioativo e os aspectos termoidráulicos e de descontaminação dos sistemas de engenharia de segurança são modelados pelo programa. Os melhores modelos disponíveis para fenomenologia de acidentes severos foram incorporados ao código, assim, diversos códigos dispersos no STCP [29] (Corcon - presente no MARCH -, VANESA, SPARC e ICEDF) foram aglutinados e incorporados ao código MAEROS [55] (transporte de aerossóis), HECTR (queima de hidrogênio) e a uma análise específica da termoidráulica da contenção [59]. Entretanto, ainda hoje há uma série de incertezas na evolução de qualquer sequência acidental com potencial derretimento do

núcleo, desta forma, o código permite que estudos de sensibilidade possam ser realizados por meio de parâmetros de entrada especificados pelo usuário.

Considerando que os fenômenos envolvendo o comportamento do aerossol, a termoidráulica da contenção e ainda o comportamento dos produtos de fissão são interdependentes, este é o principal código determinístico *best estimate*<sup>9</sup> de análise da contenção em acidentes severos aprovado pela US NRC [24].

Este código tem sido extensivamente utilizado em análises de contenções em situações hipotéticas de acidentes severos. Entre as referências que podem ser citadas e que utilizam este código para análises de contenções de reatores a água leve estão: Washington [60], Smith [61], Hyman [62], Abbey [63], Henneges [64], Gido [65], Rij [66], Russel [67] entre outros. Aplicações a experimentos para validação do código são apresentados por Soda [68], Fynbo [69], Gelbard [70] e outros, apresentando, em geral, bons resultados globais. Aplicações ao estudo de aquecimento direto da contenção e queima de hidrogênio são apresentados em Fontana [46], Park [71], Valdez [72].

A equipe de desenvolvimento do código CONTAIN procurou incluir os melhores modelos de transporte e deposição de aerossóis disponíveis à época de desenvolvimento do código. Entretanto, o Comitê Revisor do Código [73] verificou uma série de inconsistências e até mesmo equívocos nestes modelos e sugeriu uma série de mudanças e novos estudos sobre os mesmos. Dentre os novos estudos sugeridos encontram-se modelos de tratamento dos aerossóis, como por exemplo a deposição das partículas. Desta forma, o principal objetivo do presente trabalho é realizar uma verificação dos modelos de deposição de aerossóis presentes no código CONTAIN e efetuar comparações com estudos atuais. Após o esclarecimento dos modelos existentes, serão propostas alterações onde melhorias possam ser efetuadas.

---

<sup>9</sup> *best estimate*: programa computacional que realiza a melhor modelagem possível para determinado fenômeno

Neste primeiro capítulo é apresentada uma introdução aos aerossóis e suas aplicações. Os trabalhos pioneiros e fundamentais sobre o assunto são brevemente discutidos e também há o relacionamento entre poluição do ar, mortes e aerossóis. Em relação às aplicações, especial ênfase é dispensada à área nuclear, com a apresentação de alguns dos principais códigos utilizados em análise de contenções nucleares em situações hipotéticas de acidentes com derretimento de núcleo.

No segundo capítulo será apresentado um breve estudo sobre o equacionamento matemático dos aerossóis. Em primeiro lugar será discutida a “mecânica dos aerossóis”, com a apresentação dos diversos fenômenos que influenciam o comportamento deste sistema de partículas. Na sequência, a equação de dinâmica geral dos aerossóis será apresentada. Esquemas de solução desta equação serão discutidos, em particular a sua discretização e modelagem em códigos computacionais tais como o código CONTAIN. Será também apresentado um estudo inicial de deposição de aerossóis a partir da equação de conservação.

No terceiro capítulo é apresentado um estudo criterioso da deposição de aerossóis em contenções nucleares em ambientes turbulentos. Neste caso, os fenômenos determinantes na deposição das partículas são a sedimentação gravitacional e a difusão-convecção das partículas. Será realizada uma discussão e comparação com os modelos apresentados no código CONTAIN. Novas correlações serão propostas, implementadas e testadas no código.

No quarto capítulo, a deposição de partículas em escoamentos laminares na presença de gradientes de temperatura será analisada. As equações relevantes serão solucionadas e duas correlações serão propostas e comparadas com outra existente na literatura e também com o modelo presente no código CONTAIN. Os erros conceituais existentes no modelo do código atualmente serão discutidos e uma nova correlação será implementada e testada no código.

No quinto capítulo, a deposição de partículas em escoamentos laminares na presença de gradientes de concentração de gases não condensáveis e vapor será analisada. As equações relevantes para o problema serão solucionadas e a importância relativa de cada termo será discutida. Os equívocos de modelagem atual do código CONTAIN serão discutidos.

Finalmente, no sexto capítulo, as conclusões finais e sugestões para trabalhos futuros serão apresentadas.

## 2. EQUACIONAMENTO DO COMPORTAMENTO DOS AEROSSÓIS

Neste capítulo é apresentada uma introdução à mecânica dos aerossóis, ou seja, uma descrição dos fenômenos que atuam sobre estas partículas e a sua modelagem matemática através da equação de dinâmica geral. Na sequência, esta equação é discretizada e apresentada de uma forma mais diretamente aplicável a programas computacionais tais como o código CONTAIN. Finalmente, no final do capítulo, é apresentado um estudo de deposição dos aerossóis levando em conta primeiros princípios. Este desenvolvimento será importante na sequência do trabalho para confrontar a atual modelagem do código CONTAIN, principal objeto de estudo deste trabalho, com uma modelagem realizada a partir de princípios de conservação.

### 2.1 Mecânica de Aerossóis

A partir do estudo isolado dos fenômenos envolvidos na mecânica dos aerossóis, iniciou-se a busca de uma equação geral que descrevesse toda a fenomenologia a que as partículas de aerossóis estivessem sujeitas. A primeira formulação para a equação de dinâmica geral [1], descrevendo a evolução temporal do comportamento do número de partículas de aerossol por unidade de volume, foi apresentada por Müller em 1928 [74, 75]. Nesta formulação, Müller basicamente analisou a evolução temporal do número de partículas em um ambiente, com as partículas sujeitas à coagulação. Em 1958 Zebel [76] mostrou que Müller havia desconsiderado um termo em suas equações, o que as tornava incompletas, mesmo para a análise isolada do fenômeno de coagulação. A partir de então a

equação foi incorporando diversos desenvolvimentos, com particularizações para as diversas situações de interesse.

Friedlander [14] apresenta a equação de dinâmica geral dos aerossóis, levando em conta também mecanismos de perda e ganho de partículas, como sendo dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) + \nabla [\mathbf{U}(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) n(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)] - \nabla [D(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) \nabla n(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)] + \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} [I(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) n(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)] = \frac{1}{2} \int_0^\infty du \int_0^\infty dw n(\mathbf{u}, t) n(\mathbf{w}, t) K(\mathbf{u}, \mathbf{w}) \delta(\mathbf{v} - \mathbf{u} - \mathbf{w}) \\ - \int_0^\infty dw \delta(\mathbf{w} - \mathbf{v}) n(\mathbf{w}, t) \int_0^\infty du K(\mathbf{u}, \mathbf{v}) n(\mathbf{u}, t) + S(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Nesta equação,  $\mathbf{U}(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$  é o vetor soma das velocidades do fluido e das partículas;  $D(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$  é o coeficiente de difusão browniana<sup>10</sup>;  $I(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$  é a taxa de crescimento de uma partícula devido à evaporação ou condensação sobre a partícula;  $K(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  é o núcleo de coagulação e  $S(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$  representa o termo fonte independente. A dedução desta equação é apresentada nos capítulos 3 (equação de convecção-difusão) e 10 (inclusão de crescimento da partícula por condensação de vapor e coagulação) da referência [14]. Para deduzi-la, Friedlander realizou um balanço de massa em um volume elementar de controle fixo no espaço com respeito às coordenadas de laboratório. É interessante notar que a dedução da equação (2.1) acima, conforme sugerida e realizada por Friedlander, separa os fenômenos de transporte pelos contornos do volume de controle (difusão e forças externas), dos fenômenos internos ao volume de controle, ou seja, coagulação e conversão gás-partícula [14]. Nota-se também que esta equação leva também em conta o posicionamento espacial dos aerossóis.

Fisicamente, o segundo termo do lado esquerdo da equação (2.1) representa perdas devido ao movimento de convecção das partículas; o terceiro termo representa a difusão

<sup>10</sup> difusão browniana: difusão da partícula de aerossol decorrente de colisões aleatórias com as moléculas do meio

das partículas e o termo seguinte representa o crescimento/decréscimo em tamanho da partícula devido à condensação/evaporação de vapor sobre a mesma. Do lado direito desta equação, o primeiro termo representa a adição de partículas para o volume de controle analisado por coagulação (colisões de duas partículas menores), enquanto que o segundo termo representa a diminuição do número de partículas no volume de controle por coagulação (colisão destas com quaisquer outras partículas). Finalmente o último termo representa o termo fonte independente.

De forma geral, todas estas grandezas ( $U$ ,  $D$ ,  $I$ ,  $K$ ) são dependentes da posição e tempo, o que torna a equação (2.1) intratável sem que uma série de simplificações seja realizada [1]. A primeira simplificação a ser realizada é a homogeneização espacial, o que significa dizer que o ambiente em que os aerossóis se encontram esteja bem misturado, de tal forma que sua densidade seja espacialmente constante, exceto na vizinhança de superfícies. Esta homogeneização é realizada pela integração sobre todo o volume da contenção (ou de qualquer ambiente fechado) e com a definição da função distribuição média de partículas:

$$n(v,t) = \frac{1}{V} \int_V n(v,r,t) \, dr \quad (2.2)$$

Realizando as médias sobre os termos da equação (2.1) (vide referência [1], capítulo 3, por exemplo), chega-se ao seguinte resultado final:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n(v,t) + R(v,t) n(v,t) + \frac{\partial}{\partial v} [I(v,t) n(v,t)] = S(v,t) + \\ \frac{1}{2} \int_0^v du n(u,t) n(v-u,t) K(u,v-u) - n(v,t) \int_0^\infty du K(u,v) n(u,t) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Nesta equação,  $R(v,t)$  representa todos os termos de deposição sobre as paredes da contenção (difusão para as paredes, forças externas - em princípio, incorporadas no vetor

soma da velocidade do fluido e da partícula - e quaisquer outros mecanismos de remoção pela superfície - termoforese, difusioforese, fotoforese, etc., também incorporados na velocidade total do fluido mais partícula).

Podem ser encontradas variações nesta equação caso a mesma seja considerada em função da concentração em número (ao invés de concentração em massa, como apresentado neste trabalho), ou em função da fração de volume, ou para o estudo de plumas (aerossóis tipicamente liberados por chaminés em ambientes externos), ou ainda considerando a presença de partículas carregadas, por exemplo [1, 14]. Particularmente para o estudo da evolução de aerossóis após acidentes em reatores nucleares, o comportamento dos aerossóis dependerá do tamanho, forma, composição, carga e inhomogeneidades da partícula, bem como das condições ambientais e termohidráulicas. O destaque dado acima na composição das partículas é para ressaltar o fato de que, neste caso, será muito importante e significativa a presença de diferentes espécies de aerossóis na mistura. Para um aerossol bem distribuído, desprezando os efeitos de forma e carga, deseja-se calcular a função distribuição estendida de aerossóis [1]:

$$n(v_1, v_2, \dots, v_N; m_1, m_2, \dots, m_N, t) dv_1 dv_2 \dots dv_N dm_1 dm_2 \dots dm_N, \quad (2.4)$$

que corresponde ao número de partículas de aerossol que contém um volume entre  $v_p$  e  $v_p + dv_p$ , e massa entre  $m_p$  e  $m_p + dm_p$ , de espécies  $p$  ( $1 \leq p \leq N$ ). O volume total da partícula de aerossol será (deve-se salientar que uma partícula de aerossol poderá ser formada por diversas espécies químicas):

$$v = \sum_{p=1}^N v_p \quad (2.5)$$

e a massa total:

$$\mathbf{m} = \sum_{p=1}^N \mathbf{m}_p. \quad (2.6)$$

Utilizando uma notação simplificada,

$$n(v_1, v_2, \dots, v_N; m_1, m_2, \dots, m_N, t) = n(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) \quad (2.7)$$

$$\int dv_1 \int dv_2 \dots \int dv_N = \int d\mathbf{v} \quad (2.8)$$

A equação de dinâmica geral (GDE) para uma mistura de partículas com múltiplas espécies esféricas é escrita como [1]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) + R(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) n(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) + \sum_{p=1}^N \frac{\partial}{\partial v_p} \left[ I_p(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) n(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) \right] \\ & = \frac{1}{2} \int_0^\infty dv \int_0^\infty dw \int_0^\infty dq \int_0^\infty ds n(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) n(\mathbf{w}, \mathbf{s}, t) K(\mathbf{u}, \mathbf{q} | \mathbf{w}, \mathbf{s}) \\ & \quad \times \prod_{p=1}^N \delta(v_p - u_p - w_p) \delta(m_p - q_p - s_p) \\ & - n(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) \int_0^\infty du \int_0^\infty dq K(\mathbf{u}, \mathbf{q} | \mathbf{v}, \mathbf{m}) n(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) + S(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Foi introduzida homogeneização espacial, e a deposição nos contornos é considerada nos termos de deposição e remoção em substituição aos termos difusivo, gravitacional e outros possíveis de existir (termoforese, difusioforese<sup>11</sup>, fotoforese<sup>12</sup>, etc.).

Os termos do lado esquerdo da equação (2.9) representam, respectivamente, a variação temporal da concentração de partículas, a remoção devido à deposição e o crescimento das partículas por condensação. Do lado direito desta equação tem-se dois

<sup>11</sup> difusioforese: movimento das partículas de aerossóis devido à presença de gradientes de concentração de gases distintos no meio, por exemplo quando ocorre condensação de vapor na presença de um gás não condensável

<sup>12</sup> fotoforese: movimento das partículas de aerossóis devido à presença de um feixe de luz intenso

termos referentes à coagulação, com o primeiro termo trazendo partículas para o espaço de fase  $(\mathbf{v}, \mathbf{m})$  e o segundo as removendo.  $K(\mathbf{u}, \mathbf{q} | \mathbf{w}, \mathbf{s})$  é o núcleo de coagulação para partículas de volume  $\mathbf{u}$  e massa  $\mathbf{q}$ , coalescendo com partículas de volume  $\mathbf{w}$  e massa  $\mathbf{s}$ . O último termo do lado direito corresponde à fonte externa.

Por coagulação ou aglomeração de aerossóis entende-se o processo de adesão ou fusão de duas partículas quando elas se chocam. O processo de colisão só pode ocorrer devido à diferença de velocidade entre as partículas consideradas. Esta velocidade relativa pode ser causada por diversos fenômenos, sendo os principais [1, 77]: movimento browniano [78], deposição gravitacional [12, 79] e turbulência [80]. A referência [77] apresenta uma boa discussão geral sobre este fenômeno, enquanto que a referência [79] apresenta uma revisão atualizada sobre o assunto, particularmente com a discussão das expressões empregadas em códigos da área nuclear (CONTAIN [24], no caso) e algumas sugestões de aprimoramento. Neste sentido, a expressão empregada para o núcleo de coagulação atualmente no código CONTAIN é [24, 79]:

$$K = K_B + K_G + K_T \quad , \quad (2.10)$$

onde  $K_B$  se refere à coagulação browniana [24, 56, 78, 79]:

$$K_B = \frac{2\pi(D_{p,i} + D_{p,j})(\gamma_i d_{p,i} + \gamma_j d_{p,j})}{F} \quad , \quad (2.11)$$

$K_G$  se refere à coagulação gravitacional [12, 24, 79]:

$$K_G = \varepsilon(d_{p,i}, d_{p,j}) \frac{\pi}{4} (\gamma_i d_{p,i} + \gamma_j d_{p,j})^2 |V_{s,i} - V_{s,j}| \quad , \quad (2.12)$$

onde  $\varepsilon$  representa a eficiência de colisão, e finalmente  $K_T$  representa a coagulação turbulenta [24, 79, 80]:

$$K_T = \sqrt{K_{T,i}^2 + K_{T,j}^2} \quad (2.13)$$

com

$$K_{T,i} = \sqrt{\frac{\pi \epsilon_T}{120V}} (\gamma_i d_{p,i} + \gamma_j d_{p,j})^2 \quad (2.14)$$

e

$$K_{T,j} = \frac{0.04029 \rho_p^{1/4} \epsilon_T^{3/4}}{\mu^{3/4}} (\gamma_i d_{p,i} + \gamma_j d_{p,j}) \left| \frac{\rho_{p,i} C_{\gamma} d_{p,i}^3}{\chi_i} - \frac{\rho_{p,j} C_{\gamma} d_{p,j}^3}{\chi_j} \right| \quad (2.15)$$

Nas equações acima,  $\gamma$  e  $\chi$  representam fatores de aglomeração e forma, enquanto que  $\rho_p$  representa a densidade da partícula,  $V_s$  a velocidade de sedimentação por gravidade e  $\mu$  a viscosidade do meio. Discussões detalhadas sobre os termos das equações (2.11) a (2.15) podem ser encontradas nas referências [12], [24], [56], [78] e [80].

Outro importante aspecto da fenomenologia dos aerossóis é o fato destes interagirem com moléculas de gás [1, 77]. As moléculas de gás que colidem com os aerossóis podem ser absorvidas ou espalhadas. Problemas tais como chuva ácida, crescimento de gotas da chuva e absorção de vapores de iodo e césio por partículas em acidentes nucleares são exemplos de interações de partículas com gases. A magnitude e taxa destas reações dependerá de características tais como: pressão parcial dos gases constituintes, suas propriedades moleculares, constituição e tamanho das partículas, além da temperatura do meio.

A determinação da taxa de condensação de vapor sobre as partículas depende das correntes de moléculas de vapor colidindo e sendo espalhadas pela partícula [1]. A obtenção da corrente que colide sobre as partículas, em geral, é função de uma distribuição

Maxwelliana [1]. Entretanto, para que se conheça a corrente espalhada pela partícula, deve-se solucionar a equação linear de Boltzmann [1].

A equação (2.9) acima é uma equação íntegro-diferencial parcial não linear, possuindo solução analítica apenas para poucos casos especiais. Dentre estes casos especiais pode-se citar: pura coagulação para aerossóis monodispersos realizada por Smoluchowski [6], coagulação realizada por Scott [81], pura condensação realizada por Brock [82] e coagulação e condensação realizada por Ramabhadran e outros [83]. Entretanto, em todos estes casos, a modelagem dos fenômenos de coagulação e condensação é simplificada, sem uma relação direta com os modelos físicos reais.

Desde que soluções analíticas da equação (2.9), sujeita a todos os fenômenos implícitos na mesma, ou mesmo a algum destes fenômenos isolado e modelado de forma realista, não é possível, soluções numéricas devem ser empregadas [84]. Como o processo de coagulação conserva a massa e os processos de condensação e evaporação conservam o número de partículas, métodos numéricos que conservem a concentração das partículas durante os processos de condensação e evaporação, e que conservem a massa total durante a coagulação são necessários.

A transformada no espaço discreto  $J$ , associada com o método de ajuste por *cubic spline* foi utilizada por Berry [85], Middleton e Brock [86], Suck e Brock [87] e Emami e Loyalka [88] entre outros. Por este método, o volume das partículas é substituído por uma função discreta  $J$  e dois parâmetros arbitrários. Quando esta aproximação é introduzida adequadamente na equação (2.9), um conjunto acoplado de equações diferenciais ordinárias pode ser obtido em substituição à equação íntegro-diferencial. As principais aplicações deste método têm sido para análise da dinâmica da coagulação [84], muito embora também hajam estudos sobre condensação de vapor nas partículas [1, 85, 88]. Este método pode levar a resultados muito bons, entretanto com custos computacionais muito

elevados devido à excessiva repetição dos ajustes por *cubic spline* para as derivadas no espaço J [1].

O equacionamento isolado dos processos de condensação e evaporação é descrito por uma equação diferencial hiperbólica de primeira ordem. Desta forma, surgem dificuldades para solucionar esta equação de forma precisa e eficiente devido aos problemas de difusão e dispersão numérica<sup>13</sup> [1, 84]. O método dos elementos finitos tem sido empregado na busca de soluções que minimizem estes efeitos, o que foi feito por exemplo por Tsang e Brock [89] em conjunto com o método das características e *cubic splines*. O método, entretanto, não conserva o número de partículas [84]. Diversos estudos tem sido empregados para minimizar os problemas de difusão e dispersão numéricos, podendo-se citar os esforços de Tsang e Korgaonkar [90] com derivação para frente (*upwind*), Smolarkiewicz [91] com o método de predição/correção e Tsang e Rao [92, 93] com o método das características em malhas móveis e elementos finitos.

Quando se deseja simular os fenômenos de condensação e evaporação e coagulação simultaneamente, surgem novas dificuldades [84]. Uma possibilidade é a utilização do método de passos fracionais [94], em que cada processo é tratado por um esquema numérico diferente e os resultados finais são combinados sob certos vínculos. As limitações do método advêm dos erros fracionais introduzidos e de limitações no passo quando os tempos característicos diferem por ordens de magnitude (o processo mais lento “segurando” o processo mais rápido) [84].

O método seccional foi desenvolvido em 1980 por Gelbard e Seinfeld [95], apresentando um processo de discretização da variável volume semelhante ao realizado com a energia na solução da equação de transporte de neutrons (multigrupo) [96]. A idéia é subdividir o espectro de tamanhos das partículas em grupos e aproximar alguma grandeza

---

<sup>13</sup> difusão e dispersão numérica: erros introduzidos no processo de discretização das equações para obtenção de sua solução numérica

de interesse (volume ou massa total das partículas) para cada grupo. Relaciona-se esta grandeza com a densidade de partículas,  $n(v,t)$ , e soluciona-se a equação resultante. A vantagem deste método é a conservação das grandezas físicas mesmo com um pequeno número de grupos [1]. Este método também tem sido empregado com sucesso para a simulação de aerossóis com multi-componentes [97-102].

## 2.2 Modelagem da equação de dinâmica geral no código CONTAIN

Deve-se notar que os códigos nucleares não utilizam a equação (2.9) em sua forma completa. Por exemplo, o código CONTAIN [24], principal objeto de comparações do trabalho aqui desenvolvido, utiliza uma versão simplificada desta equação assumindo  $R(v,m,t)=R(v,t)$ ,  $I_p(v,m,t)=I_p(v,t)$  e  $K(u,q|w,s)=K(u|w)$ , ou seja, dependência no volume (ou massa) total da partícula apenas. Isto é feito admitindo-se que há uma relação fixa entre o volume e a massa de todas as partículas, ou seja a densidade é a mesma. De forma geral, tal suposição não é justificada pois a presença de diversas espécies químicas implicará em diferentes densidades. Entretanto, se as densidades dos materiais não diferem substancialmente (utilizando alguma densidade média), então o erro ao se fazer tal suposição não deve ser muito grande e pode bem ser encoberto por outras suposições tais como partículas esféricas e homogeneidade espacial [1].

O método numérico empregado pelo código CONTAIN é o método seccional discutido anteriormente. Desta forma, a distribuição de tamanho e composição das partículas no interior de uma célula é dividida em seções ou classes de tamanhos e são calculadas a partir do seguinte conjunto de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} Q_{i,k}(t) = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{l-1} \sum_{j=1}^{l-1} \left[ \bar{K}_{ij}^{(1a)} Q_{j,k}(t) Q_i(t) + \bar{K}_{ij}^{(1b)} Q_{i,k}(t) Q_j(t) \right] - \\
& \sum_{i=1}^{l-1} \left[ \bar{K}_{i\ell}^{(2a)} Q_i(t) Q_{i,k}(t) - \bar{K}_{i\ell}^{(2b)} Q_\ell(t) Q_{i,k}(t) \right] - \\
& \frac{1}{2} \bar{K}_{i\ell}^{(3)} Q_\ell(t) Q_{i,k}(t) - Q_{\ell,k}(t) \sum_{i=\ell+1}^m \bar{K}_{i\ell}^{(4)} Q_i(t) + \bar{G}_{\ell k}^{(1)} Q_\ell(t) - \\
& \sum_{i=1}^{N_s} \left[ \bar{G}_{i\ell}^{(2)} Q_{i,k}(t) - \bar{G}_{\ell-1,i}^{(2)} Q_{\ell-1,k}(t) \right] + \bar{G}_{\ell-1,k}^{(3)} Q_{\ell-1}(t) + \bar{S}_{\ell k}(t) - \bar{R}_{\ell k}(t) \quad ,
\end{aligned}
\tag{2.16}$$

com condições iniciais apropriadas. Para se obter estas equações, as partículas foram separadas em seções ou classes por tamanho. A interpretação dos termos acima é:  $Q_{i,k}$  é a concentração em massa [ $\text{Kg m}^{-3}$ ] das espécies  $k$  na seção  $i$ ,  $Q_\ell$  é a concentração de partículas de todas as espécies na seção  $\ell$  e os  $\bar{K}$ 's são integrais nos núcleos de aglomeração [ $\text{m}^3 \text{Kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ ].  $\bar{G}$  representa a conversão de gás para partícula (condensação e evaporação, [ $\text{s}^{-1}$ ]),  $\bar{S}$  representa o termo fonte [ $\text{Kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$ ] e  $\bar{R}$  representa os mecanismos de remoção (deposição, [ $\text{s}^{-1}$ ]). Uma hipótese implícita nesta dedução é a de que haja, ou tenha havido em algum instante anterior, algum nível de turbulência na contenção, já que esta equação é baseada na hipótese de volume bem homogeneizado. Para a deposição, em particular, o código CONTAIN modela quatro diferentes fenômenos: deposição gravitacional, difusão turbulenta para as superfícies, termoforese e difusioforese. A taxa de deposição decorrente de cada um destes fenômenos é calculada separadamente e então as taxas de deposição resultantes são adicionadas.

Nota-se ainda nesta equação que os termos de coagulação e condensação encontram-se subdivididos em diversos grupos ou seções. O significado desta divisão é discutido na referência [24], mas brevemente pode-se dizer que:

$\bar{K}_{ij}^{(ka)}$  - representa a adição de partículas do componente k na seção  $\ell$ , pela remoção do componente k na seção j quando esta partícula da seção j se coagula com uma partícula na seção i para formar uma partícula na seção  $\ell$ ;

$\bar{K}_{ji}^{(ka)}$  - representa a adição de partículas do componente k na seção  $\ell$ , pela remoção do componente k na seção i quando esta partícula da seção i se coagula com uma partícula na seção j para formar uma partícula na seção  $\ell$ ;

$\bar{K}_{i\ell}^{(ka)}$  - representa a remoção de partículas do componente k na seção  $\ell$ , resultante da coagulação de uma partícula da seção i com uma partícula da seção  $\ell$ ;

$\bar{K}_{\ell i}^{(ka)}$  - representa a adição de partículas do componente k na seção  $\ell$ , resultante da coagulação de uma partícula da seção i com uma partícula da seção  $\ell$ , com a partícula resultante permanecendo na seção  $\ell$ ;

$\bar{K}_{\ell\ell}^{(ka)}$  - representa a remoção de partículas do componente k na seção  $\ell$ , resultante da coagulação de duas partículas da seção  $\ell$  originando uma partícula de uma seção superior à

seção  $\ell$ ;

$\bar{K}_{\ell}^{(ka)}$  - representa a remoção de partículas do componente k na seção  $\ell$ , resultante da coagulação de uma partícula da seção  $\ell$ , com uma partícula de seção maior que  $\ell$ ;

$\bar{G}_k^{(b)}$  - representa a adição de partículas do componente k na seção  $\ell$ , por condensação ou evaporação do componente k em uma partícula da seção  $\ell$ ;

$\bar{G}_i^{(b)}$  - representa a remoção de partículas do componente k na seção  $\ell$ , por condensação ou evaporação do componente i em uma partícula que se transfere para fora da seção  $\ell$ ;

$\overline{G}_{\ell-1,i}^{(2)}$  - representa a adição de partículas do componente k na seção  $\ell$ , por condensação ou evaporação do componente i em uma partícula originalmente da seção  $\ell-1$ ;

$\overline{G}_{\ell-1,k}^{(3)}$  - representa a adição de partículas do componente k na seção  $\ell$ , por condensação ou evaporação do componente k em uma partícula que se transfere para a seção  $\ell$ ;

Desta forma, o código CONTAIN utiliza como taxa de remoção:

$$\overline{R}_{\ell,k} = \sum_{j=1}^{N_{str}} \text{Dep}_{j,\ell} \cdot Q_{\ell,k} \quad , \quad (2.17)$$

onde  $\text{Dep}_{j,\ell}$  é a taxa de pseudo-deposição [24] para a estrutura j dos aerossóis da seção  $\ell$ :

$$\text{Dep}_{j,\ell} = \frac{A_j}{V} (v_s + v_{dif} + v_{ter} + v_D) \quad , \quad (2.18)$$

onde:

$A_j$ - área superficial da estrutura j;

$V$  - volume da célula;

$v_s$  - velocidade decorrente da ação gravitacional;

$v_{dif}$ - velocidade devido a convecção-difusão;

$v_{ter}$  - velocidade devido a termoforese;

$v_D$ - velocidade devido a difusioforese.

Pode-se destacar que a taxa de deposição modelada no código CONTAIN não leva em conta a variação de densidade entre as espécies. Esta dependência poderia ser considerada simplesmente utilizando-se:

$$\bar{R}_{\ell,k} = \sum_{j=1}^{N_{\text{sp}}} \text{Dep}_{j,\ell}^k \cdot Q_{\ell,k} \quad , \quad (2.17-a)$$

e

$$\text{Dep}_{j,\ell}^k = \frac{A_j}{V} \left( v_s^{j,\ell,k} + v_{\text{dif}}^{j,\ell,k} + v_{\text{ter}}^{j,\ell,k} + v_{\text{D}}^{j,\ell,k} \right) \quad , \quad (2.18-a)$$

o que não é feito.

O presente trabalho se propõe a analisar a modelagem da deposição dos aerossóis no código CONTAIN. Com o intuito de não permitir que outros fenômenos interfiram na análise, é necessário isolar a deposição, não permitindo que o código modele coagulação ou condensação sobre as partículas. Assim, restringindo a modelagem do código apenas à deposição, tem-se que:

$$\frac{d}{dt} Q_{\ell,k}(t) = -\bar{R}_{\ell,k}(t) = -\sum_{j=1}^{N_{\text{sp}}} \text{Dep}_{j,\ell} \cdot Q_{\ell,k} = -\sum_{j=1}^{N_{\text{sp}}} \frac{A_j}{V} (v_s + v_{\text{dif}} + v_{\text{ter}} + v_{\text{D}}) \cdot Q_{\ell,k} \quad . \quad (2.19)$$

### 2.3 Deposição e conservação de aerossóis

O desenvolvimento apresentado pelo código CONTAIN não é o mais adequado para a análise de deposição de aerossóis. Para que a deposição dos aerossóis seja melhor compreendida, faz-se necessário um estudo isolado da mesma, levando em conta os diversos mecanismos que podem influir na deposição em cada situação de interesse.

Para analisar a deposição das partículas de aerossol seguindo as leis de conservação, considera-se que o movimento inercial da partícula não é grande comparado com o movimento induzido pelo fluxo convectivo-difusivo do gás, com os gradientes de temperatura e/ou concentração e ainda em decorrência das forças externas envolvidas. Assim, a concentração de partículas pode ser calculada pela equação de continuidade:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad , \quad (2.20)$$

onde  $\mathbf{J}$  é a corrente de partículas devido a diversos mecanismos:

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_c + \mathbf{J}_d + \mathbf{J}_T + \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_e + \dots \quad (2.21)$$

onde

$$\mathbf{J}_c = v\mathbf{n}, \quad \mathbf{J}_d = -D\nabla n, \quad \mathbf{J}_T = v_T\mathbf{n}, \quad \mathbf{J}_D = v_D\mathbf{n}, \quad \mathbf{J}_e = v_e\mathbf{n} \quad , \quad (2.22)$$

são respectivamente as correntes induzidas por convecção, difusão, termoforese, difusioforese e forças externas. Nestas equações,  $v$  é a velocidade de convecção do gás,  $D$  é o coeficiente de difusão da partícula no meio,  $v_T$  é a velocidade termoforética,  $v_D$  é a velocidade difusioforética,  $v_e$  é a velocidade da partícula de aerossol induzida por forças externas (gravidade por exemplo) e  $n(\mathbf{r},t)$  é a concentração de partículas na posição  $\mathbf{r}$ , no instante  $t$ . Nos contornos a concentração das partículas vai a zero.

Integrando a equação (2.20) sobre todo o volume:

$$\int_V d\mathbf{r} \frac{\partial n}{\partial t} = - \int_V d\mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{J} = - \int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} \quad (2.23)$$

e definindo a concentração média de partículas como

$$\bar{n} = \frac{1}{V} \int_V n(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{r} \quad , \quad (2.24)$$

tem-se finalmente que

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} = - \frac{1}{V} \int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} \quad . \quad (2.25)$$

Definindo a taxa de deposição de partículas  $\beta$  [ $s^{-1}$ ] como

$$\beta = \frac{1}{\bar{n}} \frac{1}{V} \int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} \quad . \quad (2.26)$$

e relembrando que nos contornos a concentração de partículas é igual a zero, obtém-se finalmente

$$\beta = \frac{1}{\bar{n}} \frac{1}{V} \int_S | -D \nabla n \cdot \bar{\mathbf{e}}_s | dA \quad . \quad (2.27)$$

Desta forma,

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} = -\beta \bar{n} \quad . \quad (2.28)$$

Nota-se que  $\beta$  tem o mesmo significado que  $\sum_{j=1}^{N_{\text{part}}} \text{Dep}_{j,l}$  para o código CONTAIN (vide equação (2.19)).

Para desenvolver correlações básicas para as correntes de deposição e também para as taxas de deposição, considera-se o estado estacionário desta equação:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad , \quad (2.29)$$

sujeita a condições de contorno apropriadas. Nos próximos capítulos, este desenvolvimento será utilizado levando em consideração condições específicas de interesse, quais sejam: deposição difusiva-convectiva e gravitacional em um ambiente turbulento; deposição difusiva-convectiva e termoforética em ambiente laminar; e deposição difusiva-convectiva, termoforética e difusioforética também em ambiente laminar. Os resultados desta modelagem serão comparados com os atualmente apresentados pelo código CONTAIN com o objetivo de mostrar que há a necessidade de alteração nos mesmos.

### 3. DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM AMBIENTES TURBULENTOS <sup>14</sup>

Neste capítulo é estudada a deposição dos aerossóis considerando apenas os efeitos de convecção-difusão e gravidade em um escoamento turbulento. Esta simplificação na modelagem é decorrente do fato de termoforese e difusioforese não serem fenômenos bem compreendidos e modelados em escoamentos turbulentos atualmente, conforme discutido na referência [1].

Neste caso, a corrente convectiva,  $\mathbf{un}$ , pode ser aproximada por  $-D_e \nabla n$ , onde  $D_e$  é conhecida por *eddy diffusivity* para a transferência de massa [1], e a corrente devido a forças externas  $\mathbf{v}_s n = -v_s \bar{\mathbf{k}} n$ , onde  $v_s$  é a velocidade de deposição gravitacional e  $\bar{\mathbf{k}}$  é o versor unitário na vertical, apontando de baixo para cima. Deve-se assumir também que no limite externo da camada limite, a difusão turbulenta domina a difusão browniana. Com estas aproximações, a corrente total fica:

$$\mathbf{J} = -(D + D_e) \nabla n - v_s \bar{\mathbf{k}} n \quad . \quad (3.1)$$

Considerando o divergente da corrente de partículas nulo, equação (2.29), a equação (3.1) acima resulta em:

$$-\nabla \cdot [(D + D_e) \nabla n] - v_s \bar{\mathbf{k}} \cdot \nabla n = 0 \quad . \quad (3.2)$$

<sup>14</sup> este capítulo é baseado nos artigos [99] e [100] publicados respectivamente nas revistas *Nuclear Technology* e *Transactions of the American Nuclear Society*

Crump e Seinfeld [103] solucionaram a equação (3.2) por meio de aproximações derivadas da teoria de camada limite e obtiveram como resultado para a taxa de deposição em uma contenção de forma arbitrária a seguinte expressão para a taxa de deposição:

$$B = \frac{1}{V} \int_S \frac{v_s \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}} dA}{\exp \left[ \frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e} D} \right] - 1} \quad (3.3)$$

onde:

$V$  - volume da contenção [ $\text{m}^3$ ];

$\bar{\mathbf{n}}$  - vetor unitário, normal à superfície (do gás para a superfície);

$D$  - *eddy diffusivity* turbulenta =  $k_e x^2$  [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ], onde  $x$  representa a distância à parede [m];

$v_s$  - constante relacionada com a energia de dissipação turbulenta [103, 104, 105] [ $\text{s}^{-1}$ ];

$dA$  - elemento de superfície ( $d\bar{\mathbf{s}} = \bar{\mathbf{n}} dA$ ).

Neste capítulo apresenta-se a solução detalhada da equação (3.2) para geometria esférica, mostrando que a mesma é um caso particular da equação (3.3). A solução da equação (3.2) em geometria generalizada é apresentada na referência [103]. Assumindo que (3.3) seja a solução em qualquer geometria, esta equação será simplificada para três outras geometrias de interesse em seguida.

Em primeiro lugar, é apresentado o estudo em geometria esférica. Neste caso, assumindo que a contenção esférica sendo analisada tenha um raio  $R$ , que haja simetria

azimutal e também que o coeficiente de difusão turbulento tenha apenas variação radial, a equação (3.2) torna-se:

$$-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r^2 (D + D_e) \frac{\partial n}{\partial r} \right] - \frac{(D + D_e)}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial n}{\partial \theta} \right) - v_s \frac{\partial n}{\partial r} \bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{r}} - \frac{v_s}{r} \frac{\partial n}{\partial \theta} \bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\boldsymbol{\theta}} = 0 \quad (3.4)$$

Nesta equação, nota-se que:

$$\bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\mathbf{r}} = \cos \theta \quad , \quad (3.5)$$

“

$$\bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\boldsymbol{\theta}} = -\sin \theta \quad . \quad (3.6)$$

Substituindo (3.5) e (3.6), e também realizando a seguinte mudança de variáveis:

$$x = R - r \quad , \quad (3.7)$$

a equação (3.4) resulta em

$$\frac{1}{(R-x)^2} \frac{\partial}{\partial x} \left[ (R-x)^2 (D + D_e) \frac{\partial n}{\partial x} \right] + \frac{(D + D_e)}{(R-x)^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial n}{\partial \theta} \right) - v_s \frac{\partial n}{\partial x} \cos \theta - \frac{v_s}{(R-x)} \frac{\partial n}{\partial \theta} \sin \theta = 0 \quad (3.8)$$

A expressão usualmente utilizada para o coeficiente de difusão turbulenta é [103]:

$$D_e = k_e x^2 \quad . \quad (3.9)$$

Fazendo agora uso desta expressão e também de uma nova troca de variáveis:

$$z = x \sqrt{\frac{k_e}{D}} \quad (3.10)$$

e ainda assumindo que a concentração das partículas varie apenas em uma camada próxima às paredes da contenção, sendo constante e igual a  $n_0$  longe das paredes e igual a zero na parede. o primeiro termo da equação (3.8) torna-se:

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{1}{\left(1 - \sqrt{\frac{D}{k_e}} z\right)^2} \frac{n_0}{\sqrt{k_e}} \frac{\partial}{\partial z} \left( R - \sqrt{\frac{D}{k_e}} z \right)^2 \frac{(D + Dz^2)}{\sqrt{k_e}} \frac{\partial c}{\partial z} \right] = \\ & = \frac{n_0}{R^2 \left(1 - \sqrt{\frac{D}{k_e}} \frac{z}{R}\right)^2} \frac{\partial}{\partial z} \left[ R^2 \left(1 - \sqrt{\frac{D}{k_e}} \frac{z}{R}\right)^2 \frac{D(1+z^2)}{k_e} \frac{\partial c}{\partial z} \right] = \\ & = \frac{n_0 k_e}{\left(1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z\right)^2} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left(1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z\right)^2 (1+z^2) \frac{\partial c}{\partial z} \right] \quad (3.11) \end{aligned}$$

enquanto que o segundo termo pode ser escrito como:

$$\frac{n_0 (D + Dz^2)}{\left(R - \sqrt{\frac{D}{k_e}} z\right)^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) = \frac{n_0 D (1+z^2)}{R^2 \left(1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z\right)^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) \quad (3.12)$$

o terceiro termo:

$$v_s \frac{\partial n}{\partial x} \cos \theta = \frac{n_0 v_s \cos \theta}{\sqrt{\frac{D}{k_e}}} \frac{\partial c}{\partial z} \quad (3.13)$$

e, finalmente, o último termo:

$$\frac{v_s}{(R-x)} \frac{\partial n}{\partial \theta} \sin \theta = \frac{n_0 v_s \sin \theta}{R \left( 1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z \right)} \frac{\partial c}{\partial \theta} \quad (3.14)$$

Nestas equações acima,

$$c = \frac{n}{n_0} \quad (3.15)$$

Reagrupando as equações (3.11) a (3.14) e dividindo por  $(n_0 k_e)$ , obtém-se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\left( 1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z \right)^2} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( 1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z \right)^2 (1+z^2) \frac{\partial c}{\partial z} \right] + \\ & \frac{D}{k_e R^2} \frac{(1+z)^2}{\left( 1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z \right)^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) - \\ & \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D} k_e} \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{v_s \sin \theta}{k_e R \left( 1 - \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} z \right)} \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Neste ponto, nota-se que  $x \leq \delta$ , com  $\delta$  sendo a espessura da camada limite das partículas.

Desta forma,  $z \sqrt{\frac{D}{k_e}} \leq \delta \Rightarrow z \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}} \leq \frac{\delta}{R} \ll 1$ , e o termo  $z \sqrt{\frac{D}{k_e R^2}}$  pode ser desprezado

em comparação com 1 na equação (3.16), que assim se simplifica para:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ (1+z^2) \frac{\partial c}{\partial z} \right] + \frac{D}{k_e R^2} \frac{(1+z)^2}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial c}{\partial \theta} \right) - \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{v_s \sin \theta}{k_e R} \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad (3.17)$$

Seguindo o trabalho de Crump e Seinfeld [103], é de interesse realizar um estudo comparativo das ordens de grandeza dos termos da equação (3.17). Em primeiro lugar, nota-se que a concentração adimensional de partículas, tanto para  $z=0$  ( $c=0$ ), quanto para  $z = \delta \sqrt{k_e/D}$  ( $c=1$ ), independe do ângulo  $\theta$ . Desta forma, espera-se que  $\left| \frac{\partial c}{\partial \theta} \right| \leq O(1)$  (a ordem de  $\left| \frac{\partial c}{\partial \theta} \right|$  é menor ou igual a 1), o que leva o segundo termo a uma ordem  $\frac{D}{k_e R^2} = \left( \frac{D}{k_e \delta^2} \right) \left( \frac{\delta}{R} \right)^2 \ll 1$ , tornando-o completamente negligível (utilizando-se também implicitamente o fato de que a difusão turbulenta domina a difusão browniana no limite externo da camada limite). Esta consideração, em particular, voltará a ser discutida após a obtenção de  $c(z, \theta)$ . Das considerações acima, nota-se que  $\frac{\partial c}{\partial z} \approx \frac{1}{\delta} \sqrt{D/k_e}$ , o que leva o terceiro termo a ter ordem  $\left( \frac{v_s}{\sqrt{k_e D}} \right) \left( \frac{1}{\delta} \sqrt{D/k_e} \right) = \frac{v_s}{\delta k_e}$ , enquanto que o quarto termo tem ordem  $\frac{v_s}{R k_e}$ . portanto, a razão entre o quarto e o terceiro termos tem ordem  $\frac{\delta}{R} \ll 1$  e o quarto termo é desprezado em comparação com o terceiro. Com isto, a equação (3.17) se reduz a [101, 102 e 103]:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ (1+z^2) \frac{\partial c}{\partial z} \right] - \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} \frac{\partial c}{\partial z} = 0 \quad (3.18)$$

com as condições de contorno:

$$c(0, \theta) = 0 \quad ,$$

$$c \left( \delta \sqrt{k_e/D}, \theta \right) = 1 \quad . \quad (3.19)$$

Para solucionar a equação (3.18), inicialmente realiza-se a seguinte alteração:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ (1+z^2) \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} c \right] = 0 \Rightarrow$$

$$\rightarrow (1+z^2) \frac{\partial c}{\partial z} - \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} c = p, \quad (3.20)$$

onde  $p$  é uma constante de integração. Em seguida, soluciona-se a equação (3.20) :

$$(1+z^2) dc = \left( \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} c + p \right) dz \Rightarrow$$

$$\frac{dz}{(1+z^2)} = \frac{dc}{\left( \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} c + p \right)} \Rightarrow$$

$$\operatorname{tg}^{-1} z + q = \frac{\sqrt{D k_e}}{v_s \cos \theta} \ln \left( \frac{\sqrt{D k_e}}{v_s \cos \theta} c + p \right) \Rightarrow$$

$$c = A + \frac{\sqrt{D k_e}}{v_s \cos \theta} \exp \left( \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} \operatorname{tg}^{-1} z + B \right), \quad (3.21)$$

onde  $A$  e  $B$  são constantes de integração que substituem  $p$  e  $q$ . Com a aplicação das condições de contorno (3.18), chega-se finalmente a:

$$c(z, \theta) = \frac{\exp \left( \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} \operatorname{tg}^{-1} z \right) - 1}{\exp \left[ \frac{v_s \cos \theta}{\sqrt{D k_e}} \operatorname{tg}^{-1} \left( \delta \sqrt{k_e/D} \right) \right] - 1} \quad (3.22)$$

Destacando uma vez mais o fato de que a difusão turbulenta domina a difusão browniana no limite externo da camada limite,

$$\operatorname{tg}^{-1}\left(\delta v \sqrt{k_e/D}\right) \approx \operatorname{tg}^{-1}(\infty) \approx \frac{\pi}{2} \quad (3.23)$$

que leva, finalmente, a

$$c(z,\theta) = \frac{\exp\left(\frac{v_s \cos\theta}{\sqrt{D k_e}} \operatorname{tg}^{-1} z\right) - 1}{\exp\left(\frac{\pi v_s \cos\theta}{2 \sqrt{D k_e}}\right) - 1} \quad (3.24)$$

Com a solução obtida acima pode-se confirmar uma das suposições realizadas anteriormente: a ordem de grandeza de  $\left|\frac{\partial c}{\partial \theta}\right|$ . A figura 3.1 representa justamente  $\frac{\partial c}{\partial \theta}$  em função de  $z$  e  $\theta$ , para o caso particular do diâmetro da partícula  $d_p = 1.0 \cdot 10^{-6}$  m. Desta figura, admitindo que o mesmo comportamento ocorra com as partículas de outros diâmetros, nota-se que a simplificação utilizada é justificada plenamente, já que  $\left|\frac{\partial c}{\partial \theta}\right| < 1$  para toda a gama possível de  $z$  e  $\theta$ .

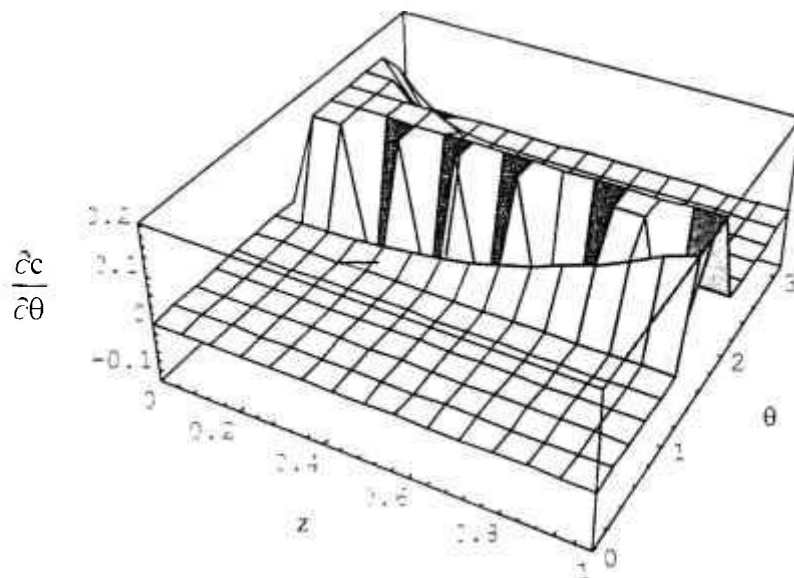


Figura 3.1 Gráfico de  $\frac{\partial}{\partial \theta} c(z,\theta)$  em função de  $z$  e  $\theta$

Com isto, o valor da concentração adimensional de partículas na camada limite torna-se conhecido e pode-se calcular a corrente de partículas sobre a parede, que corresponde exatamente à deposição das partículas sobre esta, ou seja:

$$J_{\text{dep}} = - \left\{ \left[ (D + D_s) \nabla n \right] + v_s \bar{k} n \right\} \Big|_{r=R} \quad (3.25)$$

Nota-se, entretanto, que a concentração de partículas na parede, bem como a difusão turbulenta, é nula na parede. Assim, a deposição de partículas na parede passa a:

$$J_{\text{dep}} = -n_0 D \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=R} = n_0 D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{n_0 v_s \cos \theta}{\exp \left[ \frac{\pi v_s \cos \theta}{2\sqrt{k_s D}} \right] - 1} \quad (3.26)$$

na direção radial. Integrando sobre toda a superfície, tem-se a deposição total de partículas, e dividindo-se pelo volume total e pela concentração de partículas fora da camada limite, tem-se a taxa de deposição por unidade de volume,  $\beta$ :

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{1}{n_0 V} \int_0^R 2\pi R dr \int_0^\pi d\theta \left[ \frac{n_0 v_s \cos \theta \sin \theta}{\exp \left( \frac{\pi v_s \cos \theta}{2\sqrt{k_s D}} \right) - 1} \right] = \\ &= \frac{3}{4\pi R^3} 2\pi R^2 v_s \int_0^\pi d\theta \left[ \frac{\cos \theta \sin \theta}{\exp \left( \frac{\pi v_s \cos \theta}{2\sqrt{k_s D}} \right) - 1} \right] = \\ &= \frac{3}{2R} \int_0^\pi \left[ \frac{v_s \cos \theta \sin \theta d\theta}{\exp \left( \frac{\pi v_s \cos \theta}{2\sqrt{k_s D}} \right) - 1} \right] \quad (3.27) \end{aligned}$$

Realizando a seguinte substituição de variáveis:

$$t = \frac{\pi v_s \cos \theta}{2\sqrt{k_e D}} \quad , \quad (3.28)$$

$$dt = -\frac{\pi v_s \sin \theta}{2\sqrt{k_e D}} d\theta \quad , \quad (3.29)$$

que resultam nos novos limites de integração:

$$\theta = 0 \Rightarrow t = \frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}} \quad (3.30)$$

e

$$\theta = \pi \Rightarrow t = -\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}} \quad . \quad (3.31)$$

a equação (3.27) passa a:

$$\beta = \frac{3}{2R} \int_{-\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}}}^{\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}}} \left[ \frac{v_s 2\sqrt{k_e D} t}{\pi v_s} \frac{2\sqrt{k_e D}}{\pi v_s} \frac{1}{e^t - 1} \right] dt \quad . \quad (3.32)$$

Uma nova substituição de variáveis deve ser realizada:

$$y = \frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}} \quad , \quad (3.33)$$

e a equação (3.32) finalmente resulta em:

$$\beta = \frac{3\sqrt{k_e D}}{\pi R y} \int_{-y}^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} \right] dt \quad . \quad (3.34)$$

Neste ponto, Crump e Seinfeld [103] utilizam a seguinte identidade:

$$\begin{aligned} \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} dt \right] &= \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} dt \right] + \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{1 - e^t} dt \right] = \\ &= \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} dt \right] + \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} dt \right] + \frac{y}{2} = \\ &= \frac{2}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} dt \right] + \frac{y}{2} \end{aligned} \quad (3.35)$$

que leva ao resultado final:

$$\beta = \frac{6 \sqrt{k_c D}}{\pi R} D_1 \left( \frac{\pi v_s}{2 \sqrt{k_c D}} \right) + \frac{3 v_s}{4R} \quad (3.36)$$

onde

$$D_1(y) = \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} dt \right] \quad (3.37)$$

é conhecida como função de Debye, sendo tabulada em Abramovitz e Stegun [102]. Um detalhe importante e que facilita as computações é que para  $y \gg 1$ ,  $D_1(y) \rightarrow \frac{\pi^2}{6y}$ , conforme citado na referência [103] e verificado numericamente. Nota-se que este mesmo resultado, equação (3.36), será obtida a partir da equação (3.3), aplicada para a mesma contenção esférica. O desenvolvimento acima não pretende ser a dedução geral da equação (3.3), mas apenas representar um estudo específico que mostra que a equação (3.3) corresponde à solução para a taxa de deposição das partículas no caso da contenção esférica. Assumindo agora que a equação (3.3) seja sempre válida (como demonstrado em [103]), uma formulação simplificada será apresentada para outros 3 casos de interesse: contenção

cúbica, contenção cilíndrica com eixo na horizontal e contenção cilíndrica com eixo na vertical.

No caso da contenção cúbica de lado  $L$ , a taxa de deposição, equação (3.3), é dada por:

$$\beta = \frac{1}{L^3} \int_{S_{lateral}} \frac{v_s \bar{\mathbf{n}}_{lateral} \cdot \bar{\mathbf{k}} dA}{\exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} + \frac{1}{L^3} \int_{S_{teto}} \frac{v_s \bar{\mathbf{n}}_{teto} \cdot \bar{\mathbf{k}} dA}{\exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} + \frac{1}{L^3} \int_{S_{piso}} \frac{v_s \bar{\mathbf{n}}_{piso} \cdot \bar{\mathbf{k}} dA}{\exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} \quad (3.38)$$

e nota-se que

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{n}}_{lateral} \cdot \bar{\mathbf{k}} &= 0 \\ \bar{\mathbf{n}}_{teto} \cdot \bar{\mathbf{k}} &= 1 \\ \bar{\mathbf{n}}_{piso} \cdot \bar{\mathbf{k}} &= -1 \end{aligned} \quad (3.39)$$

e também:

$$\lim_{\bar{\mathbf{n}}_{lateral} \cdot \bar{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \frac{v_s \bar{\mathbf{n}}_{lateral} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{\exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}}_{lateral} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} = \lim_{\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}} \rightarrow 0} \frac{v_s}{\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}} \exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right]} = \frac{2\sqrt{k_e D}}{\pi} \quad (3.40)$$

$$\bar{\mathbf{n}}_{teto} \cdot \bar{\mathbf{k}} = 1 \Rightarrow \frac{v_s \bar{\mathbf{n}}_{teto} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{\exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}}_{teto} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} = \frac{v_s}{\exp\left[\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} \quad (3.41)$$

$$\bar{\mathbf{n}}_{\text{pisto}} \cdot \bar{\mathbf{k}} = -1 \Rightarrow \frac{v_s \bar{\mathbf{n}}_{\text{pisto}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{\exp\left[\frac{\pi v_s \bar{\mathbf{n}}_{\text{pisto}} \cdot \bar{\mathbf{k}}}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} = \frac{v_s}{1 - \exp\left[-\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}}\right]} \quad (3.42)$$

Substituindo (3.40)-(3.42) em (3.38) e integrando:

$$\beta = \frac{4 \sqrt{k_e D} L^2}{l^3} \int_0^L \frac{1}{\exp\left[\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} - \frac{1}{L^3} \int_0^L \frac{v_s L^2}{\exp\left[\frac{-\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}}\right] - 1} \quad (3.43)$$

Reescrevendo

$$w = \frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e D}} \quad (3.44)$$

e reagrupando a equação (3.43):

$$\begin{aligned} \beta &= \frac{4v_s}{L} \frac{1}{w} + \frac{v_s}{L} \frac{1}{e^w - 1} - \frac{v_s}{L} \frac{1}{e^{-w} - 1} = \\ &= \frac{v_s}{L} \left[ \frac{4}{w} + \frac{e^w - 1 - e^{-w} + 1}{(e^w - 1)(e^{-w} - 1)} \right] = \frac{v_s}{L} \left[ \frac{4}{w} + \frac{e^w - e^{-w}}{2 - e^w - e^{-w}} \right] = \\ &= \frac{v_s}{L} \left[ \frac{4}{w} - \frac{\sinh w}{1 - \cosh w} \right] \quad (3.45) \end{aligned}$$

Utilizando agora a seguinte identidade trigonométrica hiperbólica [102]:

$$\coth \frac{w}{2} = \frac{\sinh w}{1 - \cosh w} \quad (3.46)$$

e, voltando às variáveis originais:

$$\beta = \frac{L}{L} \left[ \frac{8\sqrt{k_c D}}{\pi} + v_s \coth \left( \frac{\pi v_s}{4\sqrt{k_c D}} \right) \right] \quad (3.47)$$

Analisando um cilindro de raio  $R$  e altura  $L$  com o eixo na vertical, nota-se que, da mesma forma que para a contenção cúbica, restarão apenas integrais laterais, com  $\bar{\mathbf{n}}_{\text{lateral}} \cdot \bar{\mathbf{k}} = 0$  e as integrais de teto e piso. Com isto, o valor final calculado é igual a:

$$\beta = \frac{8\sqrt{k_c D}}{\pi R} + \frac{v_s \coth \left( \frac{\pi v_s}{4\sqrt{k_c D}} \right)}{L} \quad (3.48)$$

Invertendo a posição do eixo deste cilindro, ou seja, colocando-o na horizontal, as paredes "laterais" passam a corresponder aos discos cilíndricos, enquanto que não há sentido em se definir um "teto" ou "piso", mas apenas uma superfície "curva". Novamente sobre as superfícies laterais tem-se  $\bar{\mathbf{n}}_{\text{lateral}} \cdot \bar{\mathbf{k}} = 0$ , e sobre a superfície curva  $\bar{\mathbf{n}}_{\text{curva}} \cdot \bar{\mathbf{k}} = \cos\theta$ , o que traz o valor final de  $\beta$ :

$$\beta = \frac{4\sqrt{k_c D}}{\pi L} + \frac{v_s}{\pi R} \int_0^\pi \frac{\cos\theta d\theta}{\exp \left( \frac{\pi v_s \cos\theta}{2\sqrt{k_c D}} \right) - 1} \quad (3.49)$$

onde a integral deve ser solucionada numericamente. Nota-se que o acoplamento entre a deposição e convecção-difusão é maior nas geometrias esférica e cilíndrica com eixo na horizontal (equações (3.36) e (3.49)). Isto se deve ao fato de, nestas geometrias,  $\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{k}}$  não ser necessariamente igual a zero ou um (ou seja, os vetores não são paralelos ou perpendiculares), ampliando a sinergia entre os fenômenos.

Nos artigos [101] e [102] é apresentado o uso desta expressão e sua influência no cálculo da taxa de deposição para o código CONTAIN. A seguir esta discussão é apresentada para duas situações de interesse.

### 3.1 Resultados Para Simulações Numéricas

Conforme apresentado nesta tese, para geometrias regulares simples a equação (3.3) simplifica consideravelmente. Na tabela 3.1 a seguir esta expressão foi tabulada para geometria cúbica, esférica e cilíndrica. Nesta tabela também são apresentados os resultados utilizados presentemente no código CONTAIN para as respectivas geometrias. As expressões referentes ao código CONTAIN foram obtidas a partir de seu manual de instruções, referência [24].

Tabela 3.1: Expressões para taxa de deposição total em geometrias simples

Forma da contenção	Taxa de deposição total $\beta$ [ $s^{-1}$ ]	
	CONTAIN	Equação (3.3)
Cúbica	$\frac{v_s}{L} + \frac{6D}{L\Delta}$	$\frac{v_s}{L} \coth\left(\frac{\pi v_s}{4\sqrt{k_e} \cdot D}\right) + \frac{8\sqrt{k_e} \cdot D}{\pi L}$
Esférica	$\frac{3v_s}{2R} + \frac{3D}{R\Delta}$	$\frac{3v_s}{4R} + \frac{6\sqrt{k_e} D}{\pi R} D_1\left(\frac{\pi v_s}{2\sqrt{k_e} D}\right)$
Cilíndrica, eixo na horizontal	$\frac{v_s}{R} + \frac{2(R+L)D}{L\Delta}$	$\frac{v_s}{\pi R} \int_0^{2\pi} \frac{\cos\theta d\theta}{\exp\left(\frac{\pi v_s \cos\theta}{2\sqrt{k_e} \cdot D}\right) - 1} + \frac{4\sqrt{k_e} \cdot D}{\pi L}$
Cilíndrica, eixo na vertical	$\frac{v_s}{L} + \frac{6D}{R\Delta}$	$\frac{v_s}{L} \coth\left(\frac{\pi v_s}{4\sqrt{k_e} D}\right) + \frac{8\sqrt{k_e} D}{\pi R}$

Em seguida, serão calculadas situações hipotéticas para efeito de comparação. Em todos os casos tem-se:  $\rho=1000 \text{ Kg m}^{-3}$ ;  $T=293 \text{ K}$ ;  $l=0.30 \text{ m}$ ;  $\chi=1.0$ ;  $k_e=0.068 \text{ s}^{-1}$ ;  $\Delta=10^{-5} \text{ m}$  (valor *default* para a espessura da camada limite turbulenta no código CONTAIN). O tamanho das partículas varia entre  $d_p=10^{-8}$  e  $d_p=10^{-5} \text{ m}$ . As dimensões das contenções são:

- cúbica.  $L=0.30$  m;
- esférica.  $R=0.30$  m;
- cilíndricas.  $L=R=0.30$  m.

Inicialmente será analisada a contenção cúbica. A figura 3.2 apresenta a comparação da taxa de deposição ( $\beta$ , [ $s^{-1}$ ]) obtida pela equação (3.47) com a predição do código CONTAIN, equação (2.18) considerando apenas os efeitos de difusão-convecção e gravidade. Nota-se que para grandes valores de  $\left(\frac{\pi v_s}{4\sqrt{k_c D}}\right)$ , correspondendo a partículas com grande diâmetro (quando a velocidade de sedimentação aumenta e o coeficiente de difusão diminui), a taxa de deposição obtida a partir da expressão do código CONTAIN coincide com a obtida pela equação (3.47). Entretanto, para pequenas partículas, há uma grande diferença entre as taxas de deposição previstas, chegando esta diferença a duas ordens de magnitude. Neste limite, a deposição difusiva domina a deposição gravitacional. A previsão do código CONTAIN está equivocada basicamente por assumir que a espessura da camada limite é independente do tamanho das partículas de aerossóis, ou seja, tem um valor constante para todas as partículas (o valor *default* é  $\Delta=1 \cdot 10^{-5}$  m). Redefinindo a espessura da camada limite utilizada pelo código CONTAIN para:

$$\Delta = \frac{3\pi v_s \sqrt{D/k_c}}{4}, \quad (3.50)$$

pode-se verificar também na figura 3.2 que os resultados obtidos pela expressão do código CONTAIN se aproximam dos obtidos pela expressão (3.47). Na figura 3.3 há uma comparação dos valores da espessura da camada limite em função do diâmetro das partículas, sendo apresentado o valor constante utilizado como padrão no CONTAIN e a expressão sugerida (3.50). Muito embora o código CONTAIN utilize um valor constante

para a espessura da camada limite, espera-se uma forte dependência no diâmetro da partícula, ou seja, a influência dos efeitos viscosos perto da parede sobre as partículas ocorrerá até distâncias diferentes, com uma dependência inversamente proporcional ao diâmetro da partícula. A equação (3.50), utilizada nesta terceira figura, representa um valor esperado para a camada limite neste caso, embora sua dedução tenha sido apenas por comparação e não se mantenha para outras geometrias.

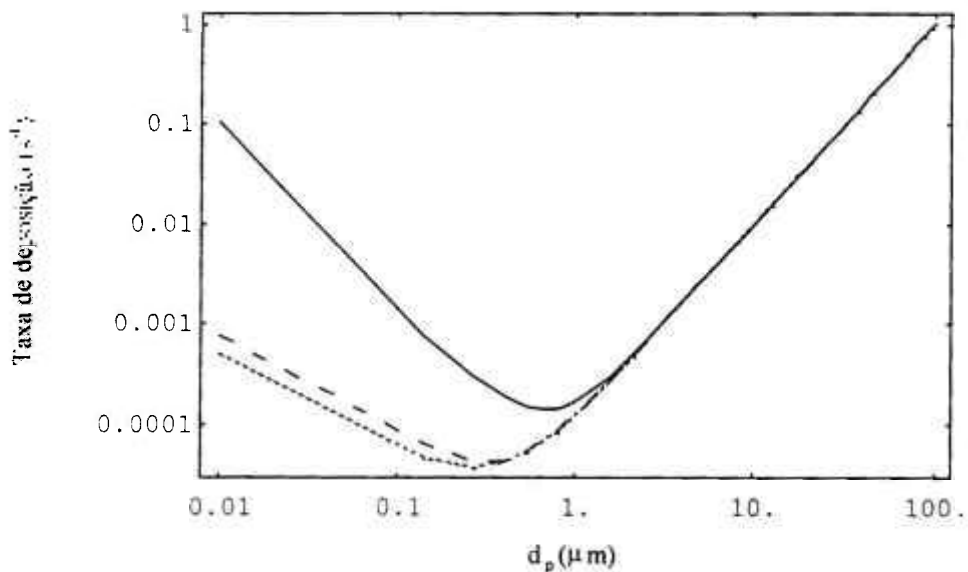


Figura 3.2 - Deposição de aerossóis em uma contenção cúbica  
 [ \_\_\_ equação original do código CONTAIN;  
 ---- equação do código CONTAIN com espessura da camada  
 limite alterada pela equação (3.50); . . . . equação (3.47)]

A figura 3.4 mostra a comparação da taxa de deposição de partículas na contenção esférica. Nota-se que neste caso o código CONTAIN uma vez mais superestima a previsão de deposição dada pela equação (3.3) (ou mais especificamente, equação (3.36)). Nota-se também que esta diferença é de aproximadamente duas ordens de grandeza para pequenas partículas. Outro ponto importante neste caso é que mesmo para grandes partículas há diferença de previsão para a taxa de deposição. Isto ocorre devido à sinergia entre os

fenômenos, que é mais forte neste caso devido às paredes não serem perpendiculares ou paralelas à deposição gravitacional.

A figura 3.5 representa a deposição de partículas em uma contenção cilíndrica com eixo na horizontal. Neste caso, a predição de deposição das partículas não apenas é consideravelmente diferente para pequenas partículas, mas também há uma sensível diferença para quais partículas irão ter o mínimo de deposição. Isto pode levar a sensíveis diferenças na predição final de deposição das partículas de aerossol, como previsto atualmente na versão do código CONTAIN.

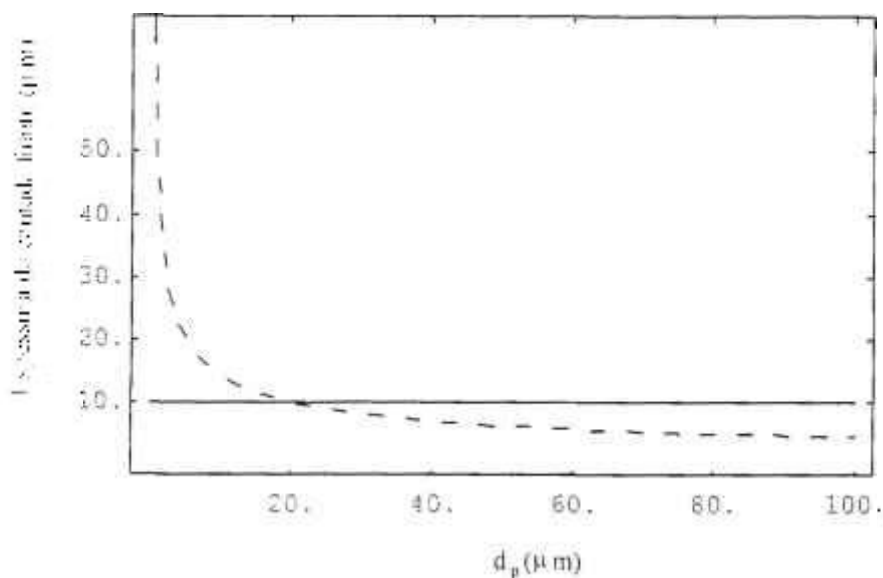


Figura 3.3 - Espessura da camada limite

[— modelagem do código CONTAIN; - - - equação (3.50)]

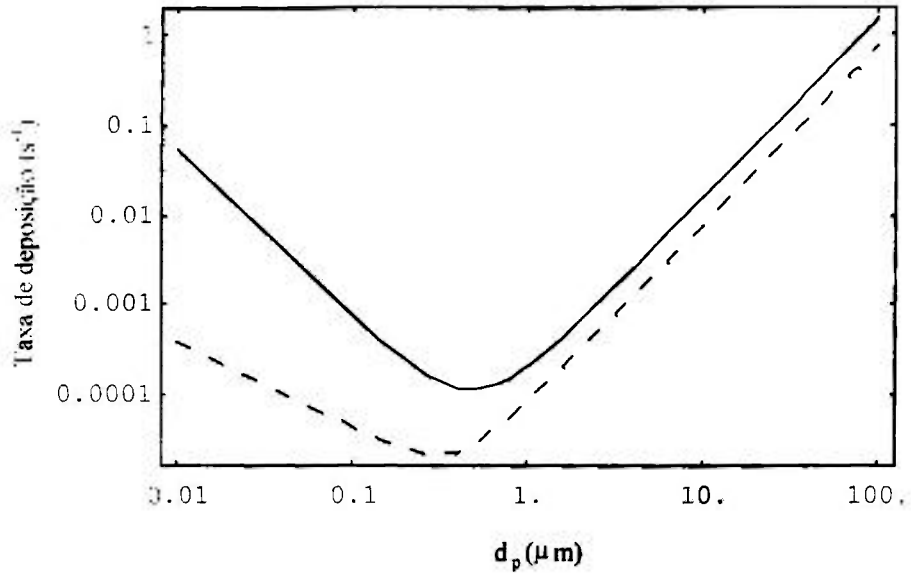


Figura 3.4 - Deposição de aerossóis em uma contenção esférica  
 [— equação original do código CONTAIN; ---- equação (3.36) ]

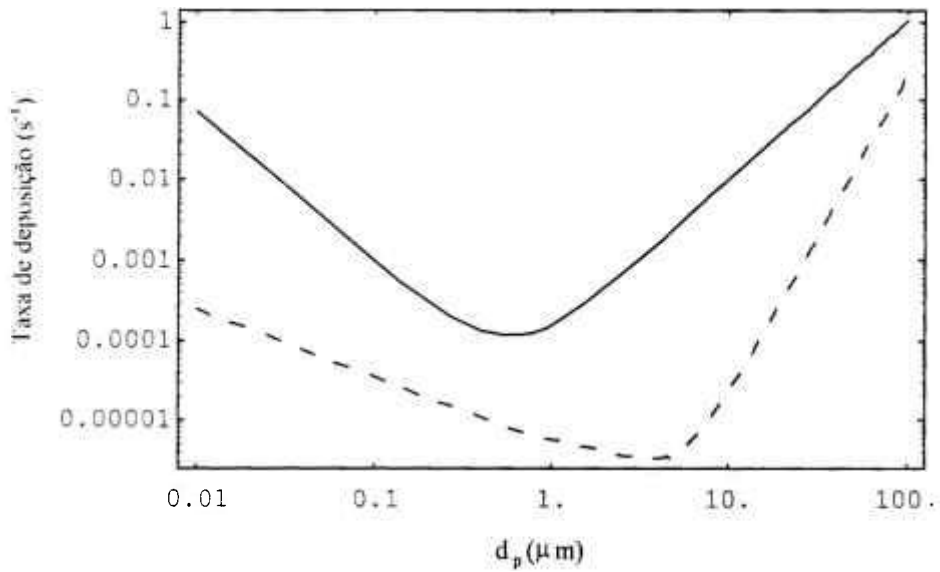


Figura 3.5 - Deposição de aerossóis em uma contenção cilíndrica, eixo na horizontal  
 [— equação original do código CONTAIN; ---- equação (3.49) ]

Estas diferenças significativas encontradas entre a modelagem atual do código CONTAIN e a modelagem desenvolvida por primeiros princípios neste trabalho justificam

a necessidade de se alterar o código CONTAIN. Na próxima seção estas alterações serão realizadas e novas comparações efetuadas.

### 3.2 Implementação do novo modelo no código CONTAIN 1.2

Considerando que a atual modelagem do código CONTAIN é insatisfatória para calcular a deposição dos aerossóis, necessita-se alterar estes modelos levando em consideração o desenvolvimento aqui apresentado. Assim, em primeiro lugar deve-se realizar um estudo detalhado do código CONTAIN e de como o mesmo realiza os cálculos e como este deve ser alterado para efetuar cálculos mais realistas. O código CONTAIN em sua versão 1.2, utilizada neste trabalho, é desenvolvido em FORTRAN e possui pouco mais de 200 000 linhas de comando.

No código CONTAIN 1.2, a subrotina AERSL é utilizada para coordenar os cálculos envolvendo mecânica de aerossóis. Esta rotina é baseada no código MAEROS [55]. A subrotina AERSL controla a deposição através das subrotinas DEPOST e COEF. Para implementar o novo modelo no código CONTAIN 1.2, as subrotinas DEPOST, COEF e AERSL foram modificadas. Uma nova função, DEBYE, foi incluída para calcular a função de Debye [106]. As seguintes alterações foram realizadas no código:

- **DEPOST**: na versão original, CONTAIN 1.2, DEPOST é chamada para calcular ou deposição gravitacional, ou difusiva ou termoforética. Na versão modificada, esta subrotina é chamada apenas uma vez para cada seção da partícula e condição atmosférica na contenção (pressão e temperatura) e fornece a deposição resultante da ação gravitacional e difusiva. O resultado final é guardado na variável COEFAV.

- **COEF**: na versão original, CONTAIN 1.2, COEF chama DEPOST três vezes por seção (tamanho de partícula) e condição atmosférica na contenção. Na versão modificada, COEF

chama DEPOST apenas uma vez para cada condição atmosférica na contenção e o resultado é a soma dos fenômenos integrados.

- **AERSL**: na versão original, CONTAIN 1.2, os resultados de DEPOST são adicionados e multiplicados pela relação entre a área e o volume da estrutura e da célula. Na versão modificada, o resultado integrado é dividido pela altura da célula, caso esta seja cúbica, ou pelo raio da mesma, no caso de uma célula esférica.

- **DEBYE**: Para calcular a deposição em uma contenção esférica, esta nova subrotina foi criada. DEBYE é chamada por DEPOST e realiza apenas uma interpolação de valores tabulados para a integral de Debye.

Estas alterações nos modelos de deposição foram analisadas na ausência de outros processos com os aerossóis (tais como coagulação) e também na presença dos mesmos. Para simular a ausência de coagulação, uma opção foi adicionada na subrotina BETA, com o termo de coagulação igualado a zero. Assim, foi possível analisar a deposição isoladamente e comparar os dois modelos. Esta alteração foi realizada apenas com o objetivo de analisar o fenômeno de deposição isoladamente, assim, para uma análise geral, a função original BETA é utilizada.

O primeiro caso analisado representa uma contenção cúbica com volume de 1000 m<sup>3</sup> com uma distribuição inicial log-normal de aerossóis com diâmetros entre 10<sup>-8</sup> a 10<sup>-4</sup> m e diâmetro inicial médio de 5 10<sup>-7</sup> m. A pressão e temperatura na contenção são mantidas a 10<sup>5</sup> Pa e 383 K. A massa inicial de aerossol disperso é de 250 Kg, e as partículas são compostas única e exclusivamente por vapor d'água. O comportamento dos aerossóis é acompanhado por um período de duas horas. Os resultados preditos para a concentração em massa dos aerossóis, considerando apenas deposição, são apresentadas nas figuras 3.6 a 3.8. Nota-se que a versão original do código CONTAIN 1.2 e a versão modificada do código predizem resultados consideravelmente diferentes para partículas pequenas,

chegando esta diferença a várias ordens de magnitude. Nota-se ainda que, neste caso, a versão original do código CONTAIN não é conservativa, desde que sua previsão para a concentração em massa dos aerossóis na contenção é inferior à obtida com cálculos mais realistas. A seguir, a dinâmica dos aerossóis é simulada para as mesmas condições físicas, mas levando em consideração o fenômeno de coagulação. Neste caso, verifica-se que tanto a versão original quanto a versão modificada apresentam basicamente o mesmo resultado para a deposição das partículas. Desde que a coagulação rapidamente move a distribuição das partículas para tamanhos maiores (devido à concentração relativamente elevada das partículas), e a versão original do código apresenta uma boa modelagem para deposição destas partículas, este resultado não é surpreendente.

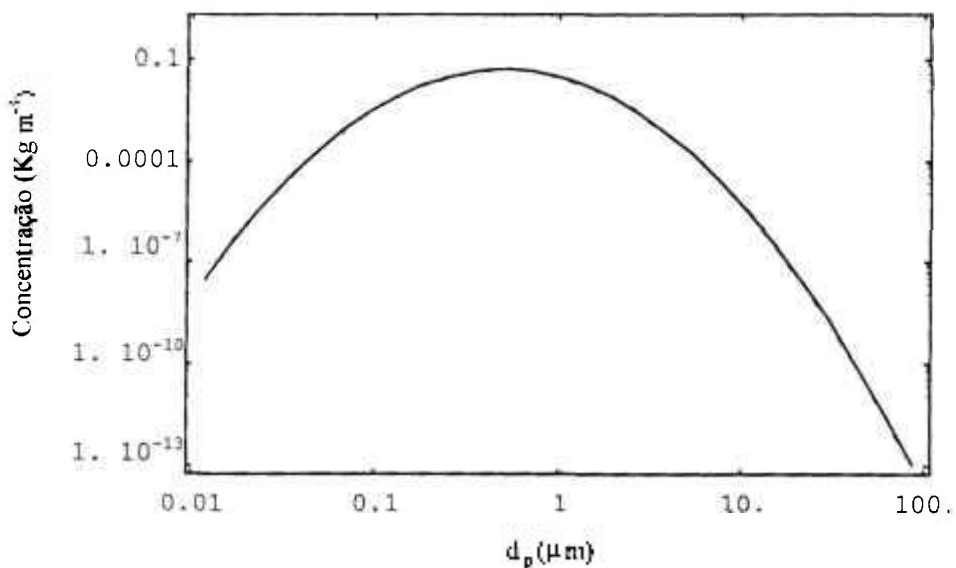


Figura 3.6. Distribuição inicial de aerossóis, t=0

O segundo caso modelado apresenta os mesmos dados para a distribuição de aerossóis e temperatura em uma contenção esférica com raio de 5 m. A distribuição inicial é a mesma apresentada na figura 3.6. Os resultados preditos para a concentração em massa dos aerossóis, quando apenas o fenômeno de deposição é simulado, são apresentados nas figuras 3.9 e 3.10. Deve-se notar que as versões original e modificada do código CONTAIN 1.2 predizem resultados consideravelmente diferentes para praticamente todas

as partículas por diversas ordens de magnitude. A seguir, a dinâmica dos aerossóis é simulada para as mesmas condições físicas, mas considerando coagulação. Os resultados são apresentados nas figuras 3.11, 3.12 e 3.13, sendo que a figura 3.13 representa a superposição das figuras 3.6 e 3.12. Desta vez a versão original do código CONTAIN 1.2 subestima a concentração das grandes partículas de aerossóis. Nota-se que, para contensões esféricas, o resultado do CONTAIN também não é conservativo, já que sua predição para a concentração em massa dos aerossóis é inferior aos resultados decorrentes de um cálculo mais realista, mesmo quando se permite que as partículas de aerossóis coagulem.

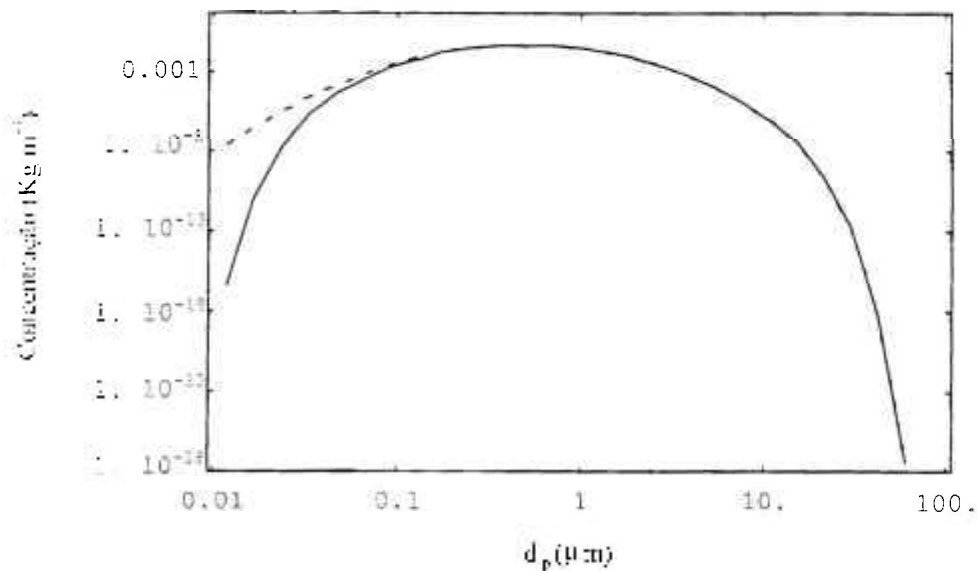


Figura 3.7. Distribuição de aerossóis em uma contenção cúbica;

apenas deposição -  $t=3600$  s

(linha tracejada - CONTAIN 1.2 modificado; linha sólida - CONTAIN 1.2 original)

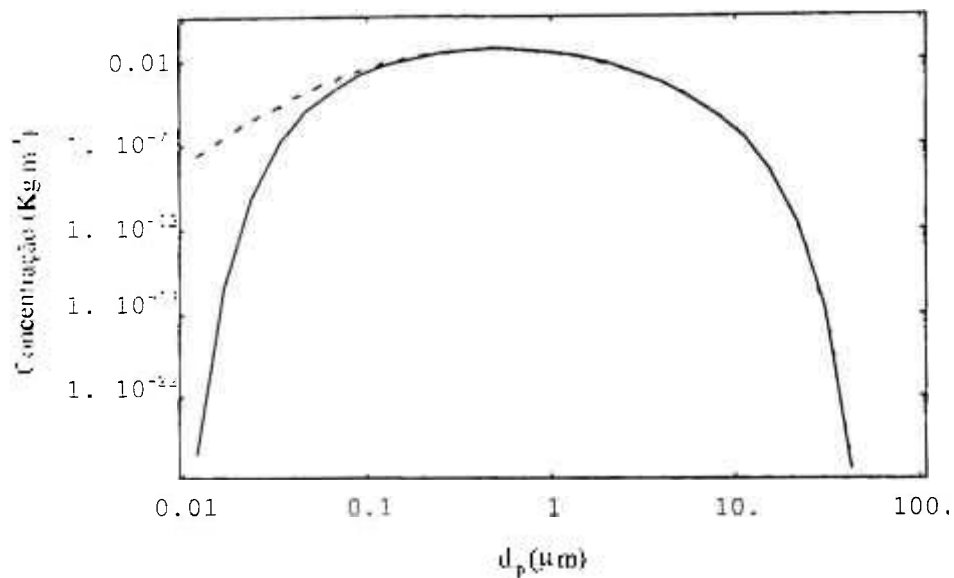


Figura 3.8. Distribuição de aerossóis em uma contenção cúbica;  
apenas deposição -  $t=7200$  s

(linha tracejada - CONTAIN 1.2 modificado; linha sólida - CONTAIN 1.2 original)

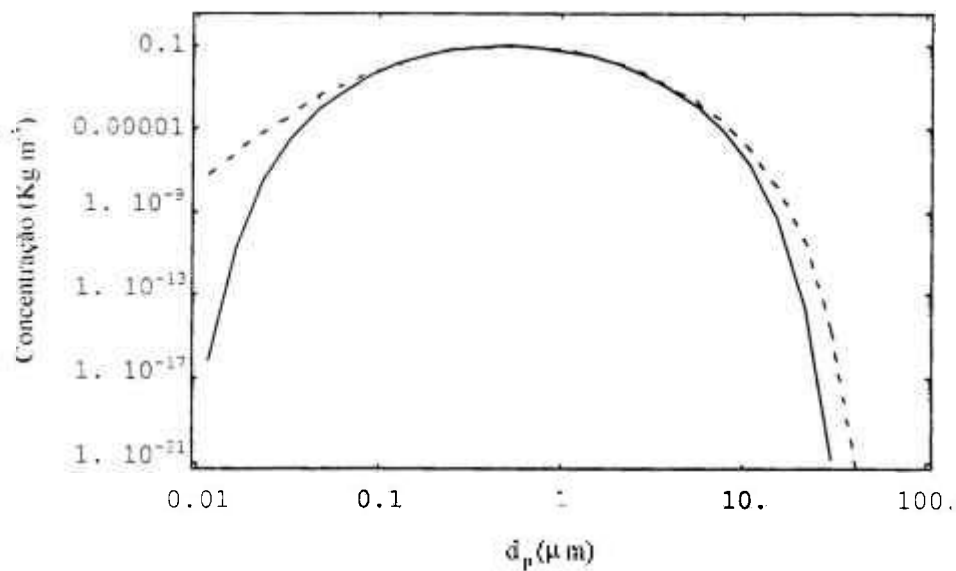


Figura 3.9. Distribuição de aerossóis em uma contenção esférica;  
apenas deposição -  $t=3600$  s

(linha tracejada - CONTAIN 1.2 modificado;  
linha sólida - CONTAIN 1.2 original)

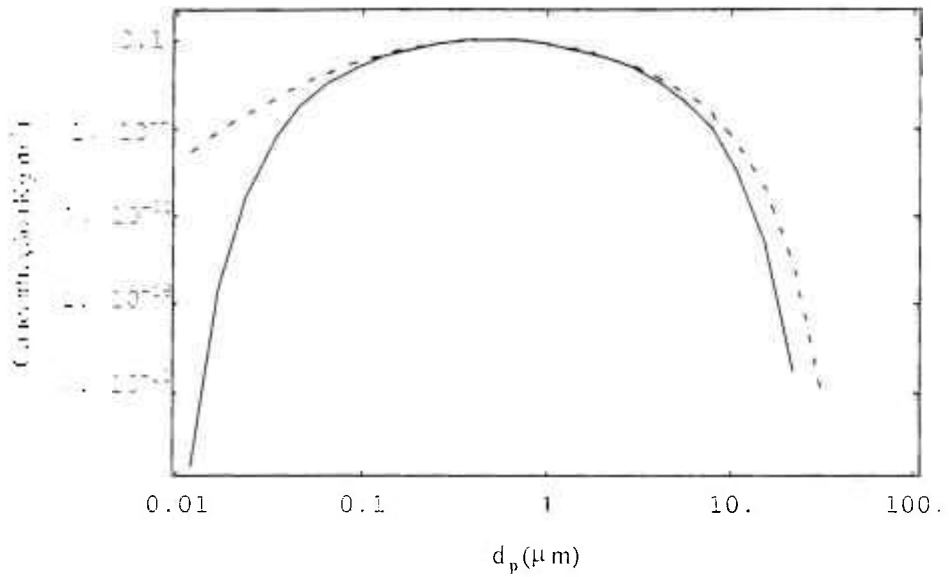


Figura 3.10. Distribuição de aerossóis em uma contenção esférica;  
 apenas deposição - 7200 s  
 (linha tracejada - CONTAIN 1.2 modificado;  
 linha sólida - CONTAIN 1.2 original)

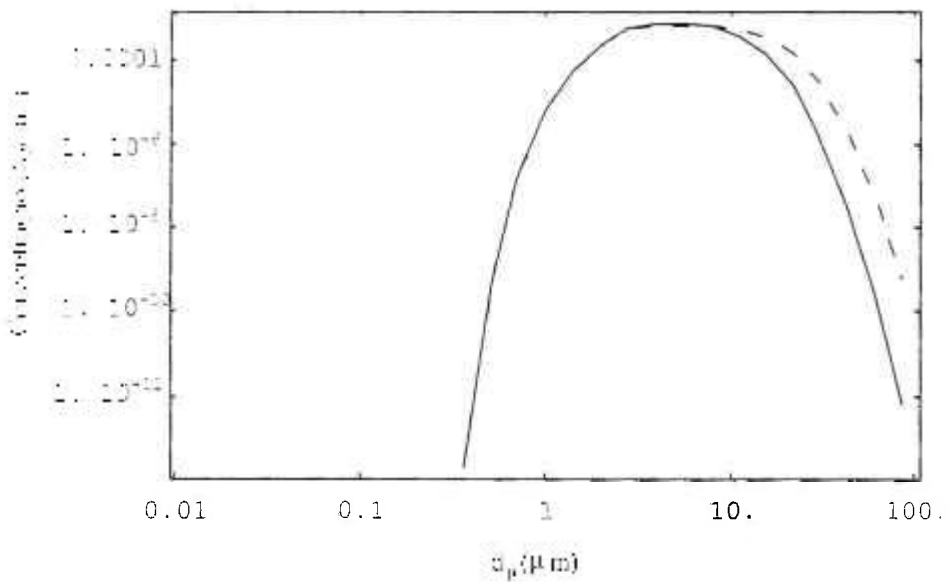


Figura 3.11. Distribuição de aerossóis em uma contenção esférica;  
 coagulação e deposição - 3600 s  
 (linha tracejada - CONTAIN 1.2 modificado;  
 linha sólida - CONTAIN 1.2 original)

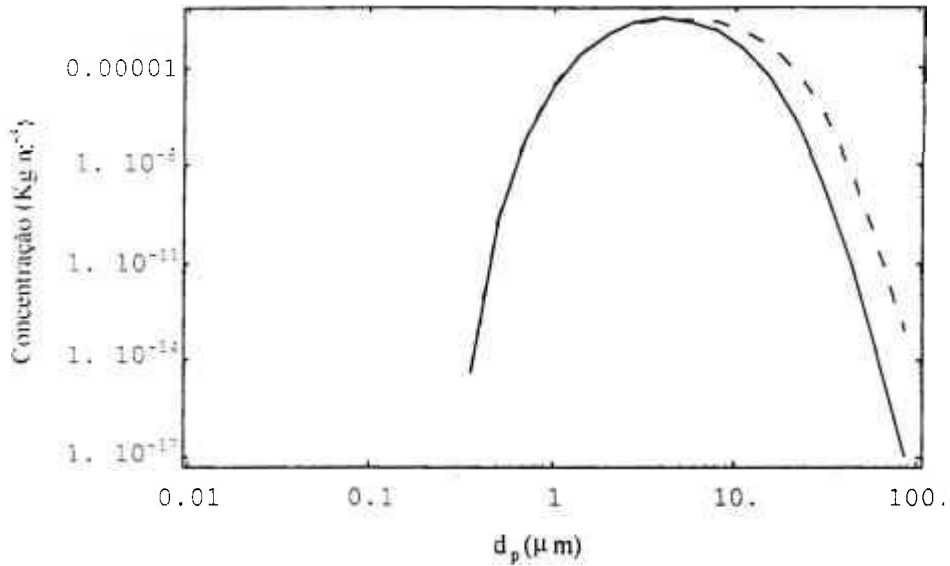


Figura 3.12. Distribuição de aerossóis em uma contenção esférica;  
 coagulação e deposição - 7200 s  
 (linha tracejada - CONTAIN 1.2 modificado;  
 linha sólida - CONTAIN 1.2 original)

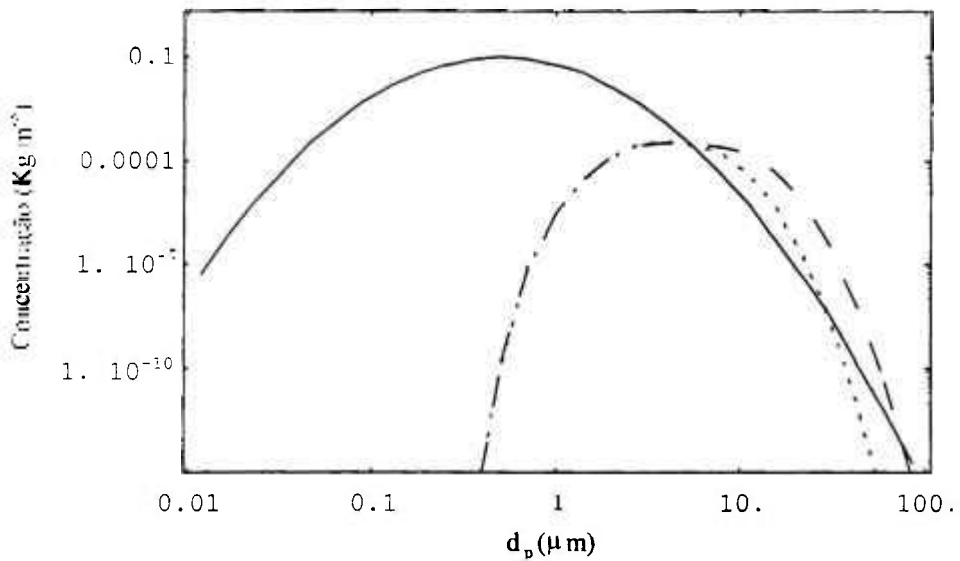


Figura 3.13. Distribuição de aerossóis em uma contenção esférica;  
 deposição e coagulação (linha sólida - distribuição inicial;  
 linha tracejada - versão modificada do código CONTAIN 1.2 após 7200 s;  
 linha pontilhada - versão original do código CONTAIN 1.2 após 7200 s)

### 3.3 Conclusões

Neste capítulo as expressões da taxa de deposição do código CONTAIN e uma expressão alternativa foram comparadas. Deste estudo comparativo, foi visto que o código CONTAIN superestima a taxa de deposição de partículas pequenas em todas as geometrias estudadas, além de superestimar a deposição de partículas maiores em algumas geometrias específicas. A nova expressão, equação (3.3), foi implementada para as geometrias cúbica e esférica. Observou-se que a versão modificada do código CONTAIN prevê diferentes resultados para a concentração em massa dos aerossóis em relação à versão original. A natureza e magnitude destas diferenças é afetada pela presença de outros processos, como por exemplo coagulação, bem como pela geometria da contenção.

Finalizando, deve-se enfatizar que devido à natureza não linear dos processos de dinâmica dos aerossóis (particularmente a coagulação das partículas) e também à complexidade dos mesmos, não é possível prever qual será o impacto que estas melhorias sugeridas para os modelos de deposição turbulenta terão nos resultados finais calculados. Entretanto, é importante salientar que a modelagem atual do código realiza um cálculo não conservativo da deposição das partículas (prevê que mais partículas se depositem por unidade de tempo) e que pode ser agravada ainda mais caso seja analisado um cenário com a presença de gradientes de temperatura e presença de ar e vapor. Isto ocorrerá pois a modelagem atual destes fenômenos no código irá aumentar a deposição das partículas, mas tal modelagem só é válida para escoamentos laminares. Em situações turbulentas, atualmente, o mais adequado é realizar o cálculo da deposição das partículas como desenvolvido neste capítulo.

#### 4. DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS NA PRESENÇA DE GRADIENTES DE TEMPERATURA<sup>15</sup>

Neste capítulo é analisada uma contenção nuclear em que ocorre convecção natural laminar. Esta análise se restringirá ao limite laminar por ser este relevante para a análise de acidentes e também porque esta análise é matematicamente mais simples. Nota-se que a velocidade termoforética em regimes turbulentos apresenta uma série de dúvidas e incertezas atualmente [1, 108], e por outro lado foram levantadas dúvidas sobre a modelagem de fluxos laminares no código CONTAIN [73].

O principal ponto de interesse é a deposição de partículas na presença de um gradiente de temperatura entre o meio e uma parede assumida vertical. Será discutida a deposição sujeita à convecção difusiva e termoforese. Serão apresentadas soluções numéricas para as equações na camada limite para as variáveis corrente e velocidade de deposição e a importância relativa dos fenômenos de difusão e termoforese também será analisada. Finalmente, algumas correlações úteis para os códigos de análise de contenções nucleares fechadas serão discutidas.

---

<sup>15</sup> Este capítulo é baseado no artigo [107], publicado na revista *Nuclear Technology*

#### 4.1 Análise de deposição termoforética

A análise realizada no capítulo 2 desta tese, com o estudo de deposição segundo as leis de conservação permanece válida, ou seja, partindo-se da equação (2.20) e chegando-se à equação (2.29). No presente capítulo, o interesse é em discutir a deposição dos aerossóis em uma placa vertical semi-infinita, sujeita a um gradiente de temperatura. Assim, espera-se um fluxo de convecção natural que será mantido laminar. Assume-se ainda que a placa vertical está mais fria que o ar circulante e que a pressão permanece constante durante a sequência analisada, ou seja, considera-se a deposição dos aerossóis mas não a sua resuspensão. Desde que o ar deve se mover no sentido descendente sobre a placa, posiciona-se o sistema de coordenadas com o eixo  $x$  na direção vertical e apontando para baixo, enquanto que o eixo  $y$  encontra-se na direção perpendicular à placa, apontando da placa para o meio, conforme pode ser visto na figura 4.1. Desta forma, as equações de Navier-Stokes e de continuidade das partículas [1, 109]

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad , \quad (4.1)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -B(T - T_x) \mathbf{g} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad , \quad (4.2)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T \quad , \quad (4.3)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla n = D \nabla^2 n - \nabla \cdot [(\mathbf{v}_T + \mathbf{v}_c)n] \quad , \quad (4.4)$$

podem ser reduzidas ao conjunto de equações

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad , \quad (4.5)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{(T_\infty - T)}{T_\infty} g + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (4.6)$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (4.7)$$

$$u \frac{\partial n}{\partial x} + v \frac{\partial n}{\partial y} = D \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} - \frac{\partial(v_{th} n)}{\partial y} \quad (4.8)$$

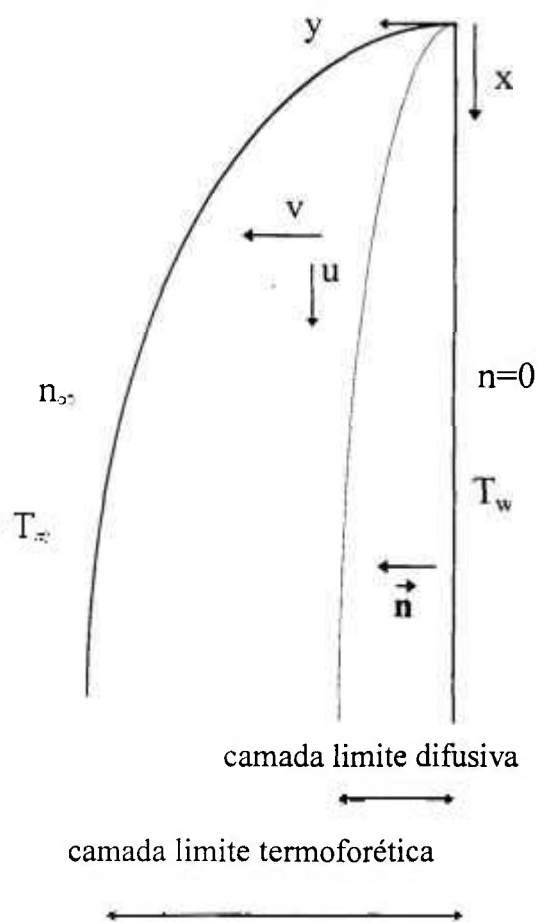


Figura 4.1 - Camadas limites

Alguns pontos devem ser ressaltados com respeito a este equacionamento. As equações de Navier-Stokes aqui representadas na verdade já incluem diversas simplificações, como por

exemplo assumir que o ar possa ser representado por um fluido newtoniano com viscosidade cinemática e difusividade térmica constantes. Outra suposição importante se refere à aproximação de Boussinesq [109, 110], em que a densidade do ar é considerada incompressível, exceto no termo gravitacional na equação do momento. Deve-se notar ainda que a deposição gravitacional não foi considerada na equação de continuidade das partículas. Esta última simplificação implica em que a presente análise se restringe às partículas menores que  $\sim 0.5 \mu\text{m}$ , já que para partículas maiores a deposição gravitacional passa a dominar a deposição total das partículas. Entretanto, tal simplificação permite a solução da equação (4.8) por meio de técnicas de similaridade, como será visto neste capítulo. ao contrário do que ocorre quando a equação com o termo gravitacional é considerada. Nestas equações,

$\mathbf{u} = u \vec{i} + v \vec{j}$  é a velocidade do gás;

$B \approx \frac{1}{T_x}$  é o coeficiente de expansão térmica para o fluido, representando no caso o único termo que incorpora a compressibilidade do ar. de acordo com a aproximação de Boussinesq [109, 110];

$T$ ,  $T_x$  e  $T_w$  são as temperaturas do fluido dentro da camada limite, do meio longe da parede e da parede;

$\nu$  é a viscosidade cinemática do meio ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ );

$\alpha = \frac{k_g}{\rho c_p}$  é a difusividade térmica ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ );

$n_x$  é a concentração de aerossóis longe da parede (partículas  $\text{m}^{-3}$ );

$v_{th} = -K \frac{\nu}{T} \nabla T$  é a velocidade termoforética ( $\text{m s}^{-1}$ ).

A constante termoforética,  $K$ , utilizada em todo o desenvolvimento desta tese, é a apresentada no código CONTAIN [24].

As condições de contorno associadas com as equações (4.5)-(4.8) são:

$$u(0, y) = u(x, 0) = u(x, \infty) = 0 \quad ; \quad (4.9)$$

$$v(x, 0) = 0 \quad ; \quad (4.10)$$

$$T(0, y) = T(x, \infty) = T_{\infty} \quad ; \quad (4.11)$$

$$T(x, 0) = T_w \quad ; \quad (4.12)$$

$$n(0, y) = n(x, \infty) = n_{\infty} \quad ; \quad (4.13)$$

$$n(x, 0) = 0 \quad . \quad (4.14)$$

Para a obtenção de uma solução por similaridade o desenvolvimento apresentado por Schlichting, referência [109], pode servir de base (outras referências correlacionadas são: [110], [111], [112]). Com a função  $\psi$ ,

$$\mathbf{u} = \frac{\partial \psi}{\partial y} ; \quad \mathbf{v} = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad , \quad (4.15)$$

c

$$\psi = 4 \nu a x^{3/4} \zeta(\eta) \quad , \quad (4.16)$$

$$\theta = \theta(\eta) \quad , \quad (4.17)$$

$$c = c(\eta) \quad , \quad (4.18)$$

onde:

$$a = \left[ \frac{\mu_e (T_x - T_{wall})}{\rho v^2 T_x} \right]^{1/2} \quad , \quad (4.19)$$

$$\eta = a y x^{-1/2} \quad , \quad (4.20)$$

$$\zeta = \frac{T_x - T}{T_x - T_w} \quad , \quad (4.21)$$

$$\theta = \frac{c}{n_s} \quad , \quad (4.22)$$

Assim, as novas variáveis  $\zeta$ ,  $\theta$  e  $c$  serão determinados a partir das equações

$$\zeta'''' + 3 \zeta \zeta'' - 2 (\zeta')^2 + \theta = 0 \quad , \quad (4.23)$$

$$\theta'' + 3 \text{Pr} \zeta \theta' = 0 \quad , \quad (4.24)$$

$$c'' - \text{Sc} \left( 3 \zeta - \frac{K \Delta T \theta'}{T_x - \Delta T \theta} \right) c' - \frac{\text{Sc} K \Delta T}{T_x - \Delta T \theta} \left[ \theta'' + \frac{\Delta T}{T_x - \Delta T \theta} (\theta')^2 \right] c = 0 \quad , \quad (4.25)$$

Estas equações resultam da substituição das equações (4.15) a (4.18) nas equações (4.5) a (4.8). As equações (4.23) e (4.24) são padrão, referências [109, 110], enquanto que a equação (4.25) é desenvolvida pelo mesmo princípio. O desenvolvimento desta última equação é apresentado no segundo apêndice desta tese. Na equação (4.24),  $\text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}$  é o número de Prandtl, e na equação (4.25),  $\text{Sc} = \frac{\nu}{D}$  é o número de Schmidt. As condições de contorno apropriadas para estas equações são:

$$\zeta(0) = \zeta'(0) = 0; \quad \zeta'(\infty) = 0 ; \quad (4.26)$$

$$\theta(0) = 1; \quad \theta(\infty) = 0 ; \quad (4.27)$$

$$c(0) = 0; \quad c(\infty) = 1 . \quad (4.28)$$

Estas condições de contorno são diretamente derivadas de (4.9) a (4.14).

As equações (4.23) e (4.24) representam um sistema acoplado de equações diferenciais de valor no contorno. As equações podem ser solucionadas numericamente, e tais soluções foram reportadas por Schlichting [109], Nazaroff e Cass [110], Sparrow, Tsou e Kurtz [111] e Ede [112], entre outros. De forma geral, a solução é obtida por meio da transformação deste problema em um problema de condições iniciais. A tabela 4.1 lista resultados apresentados por alguns destes autores, particularmente para a condição inicial que substitui a condição de contorno longe da parede. Verificou-se numericamente, como mostrado também nesta tabela, que para a maioria dos propósitos práticos, estes resultados estão corretos. A presente solução numérica utilizou o *shooting method*, ou seja, estimam-se valores iniciais para  $\zeta''(0)$  e também para  $\theta'(0)$  e verifica-se se as soluções das equações (4.23) e (4.24) com estas novas condições de contorno concordam com as condições de contorno corretas,  $\zeta'(\infty)=0$  e  $\theta(\infty)=0$ . Caso não haja a concordância, o problema é recalculado com novos valores de  $\zeta''(0)$  e  $\theta'(0)$  até que ocorra a convergência. As figuras 4.2 e 4.3 apresentam os gráficos para  $\zeta$  e  $\theta$  em função de  $\eta$ , para o caso particular  $Pr=0.72$ .

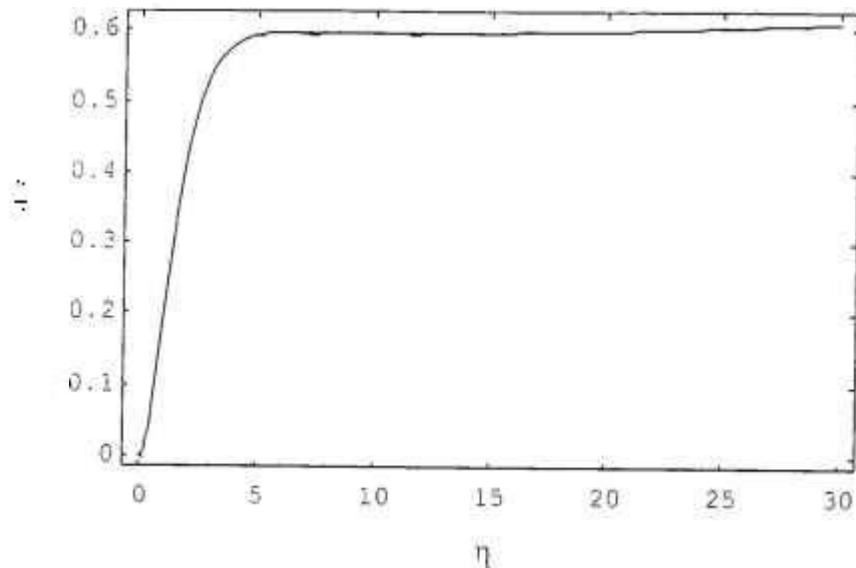


Figura 4.2 -  $\zeta(\eta)$ ,  $Pr=0.72$

As equações (4.23) e (4.24) usualmente surgem quando há o interesse em se conhecer a transferência de calor entre o meio e a parede. Nota-se que, para a transferência de calor, a definição

$$h \Delta T = k_w \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} \quad (4.29)$$

leva a

$$Nu = \frac{h L}{k_w} = \frac{L}{\Delta T} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = - \frac{L}{\Delta T} \Delta T \left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right|_{y=0} = -a x^{-1/4} L \theta'(0) \quad (4.30)$$

com  $Nu$  sendo o número de Nusselt e  $\Delta T = T_\infty - T_w$ . Integrando sobre todo o comprimento da parede, tem-se que:

$$Nu = - \frac{1}{L} \int_0^L a x^{-1/4} L \theta'(0) dx = - \frac{4 a L^{3/4} \theta'(0)}{3} \quad (4.31)$$

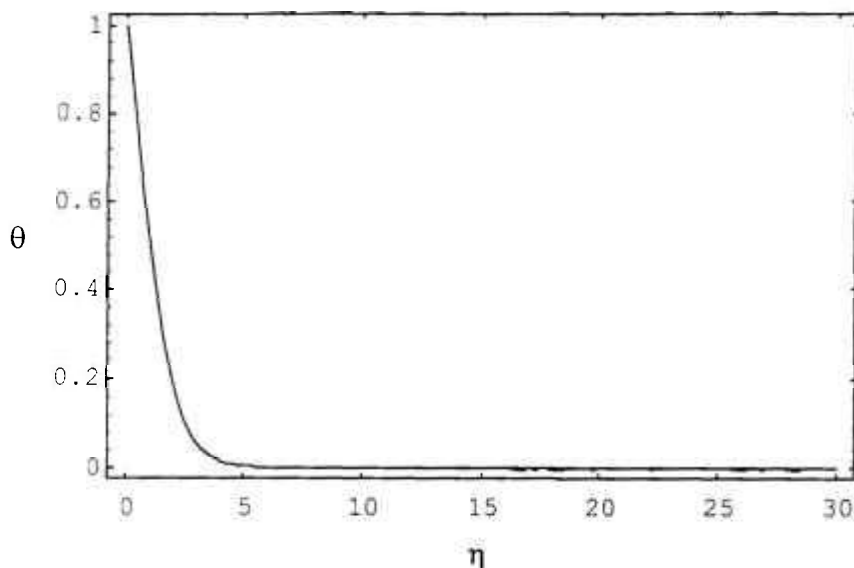


Figura 4.3 -  $\theta(\eta)$ ,  $Pr=0.72$

Nestas equações,  $k_g$  é a condutividade térmica do gás, e  $h$ , o coeficiente de transferência de calor [ $Kg\ s^{-3}\ K^{-1}$ ], é a média sobre todo o comprimento da parede. Da solução do conjunto de equações para o fluxo laminar sobre a parede vertical, (4.23) e (4.24) acima, podem ser construídas correlações para o número de Nusselt. Em particular para  $Pr$  aproximadamente 0.733, Schlichting [109] apresenta:

$$Nu = 0.517 (Pr\ Gr)^{1/4} \quad (4.32)$$

Tabela 4.1 - Condições de contorno para equações (4.23) e (4.24)

Pr	$\zeta''(0)$	$\zeta''(0)$	$\theta'(0)$	$\theta'(0)$
	Referência [111]	presente resultado	Referência [111]	presente resultado
0.72	0.675955	0.676020	-0.504630	-0.504634
0.733 *	0.674181	0.674182	-0.507889	-0.507908
1.0	0.642175	0.642188	-0.567140	-0.567147
1.5	0.600507	0.600501	-0.651536	-0.651535
2.0	0.571279	0.571263	-0.716485	-0.716466
3.5	0.516054	0.515827	-0.855821	-0.855662
5.0	0.481761	0.481790	-0.953955	-0.954003
7.0	0.450692	0.450780	-1.054184	-1.054310

\* resultado reportado na referência [109]

Nesta equação,  $Gr = \frac{(g \Delta T L^3)}{\nu^2 T_\infty}$  é o número de Grashof. O produto Pr Gr também é conhecido como Ra, ou número de Rayleigh [1]. Os presentes cálculos indicaram que a equação (4.32) é uma boa aproximação para toda a gama de valores de Pr entre 0.72 e 2.0, para uma variação de Gr entre  $1.4 \cdot 10^8$  e  $3.5 \cdot 10^9$ , conforme pode ser visto na tabela 4.2. Para a confecção desta tabela, a temperatura da parede vertical foi mantida a 293 K, enquanto que a temperatura ambiente variou entre 294 K e 343 K.

Tabela 4.2 Correlações para o número de Nusselt, Nu

Pr	Gr = 1.429 10 <sup>8</sup>		Gr = 1.246 10 <sup>9</sup>		Gr = 3.555 10 <sup>9</sup>	
	Eq.(4.31)	Eq.(4.32)	Eq.(4.31)	Eq.(4.32)	Eq.(4.31)	Eq.(4.32)
0.72	52.0183	52.069	89.382	89.469	116.173	116.287
0.733	52.355	52.303	89.962	89.871	116.927	116.808
1.0	58.462	56.526	100.455	97.127	130.565	126.240
1.5	67.161	62.556	115.402	107.489	149.992	139.707
2.0	73.854	67.221	126.902	115.504	164.94	150.125
3.5	88.203	77.315	151.557	132.849	196.984	172.669
5.0	98.340	84.526	168.976	145.239	219.624	188.773
7.0	108.680	91.943	186.742	157.985	242.716	205.339

Com  $\zeta$  e  $\theta$  assim disponível, a conclusão do problema passa a depender apenas da solução da equação (4.25). Para solucionar esta equação, para cada conjunto de Pr e Sc, alteram-se as condições de contorno para condições iniciais:

$$c(0) = 0; \quad c'(0) = 1 \quad , \quad (4.33)$$

e normaliza-se esta solução:

$$c(\eta) \leftarrow \frac{c(\eta)}{c(\infty)} \quad , \quad (4.34)$$

satisfazendo assim ambas as condições de contorno da equação (4.25). O programa Mathematica [113] foi utilizado para solucionar numericamente o sistema de equações (4.23) a (4.25), sujeitas a (4.26) a (4.28).

Nota-se que uma versão simplificada da equação (4.25),

$$c'' + Sc \left( 3\zeta - \frac{K \Delta T \theta'}{T_x} \right) c' = 0 \quad (4.35)$$

foi considerada por Nazaroff e Cass [110], que estavam interessados na modelagem da deposição devido a pequenos gradientes de temperatura. Eles mantiveram o valor  $Pr=0.72$  fixo. O apêndice 2 apresenta uma pequena discussão sobre as justificativas apresentadas por Nazaroff e Cass para as aproximações por eles realizadas.

Uma vez conhecida a concentração de partículas na camada limite, pode-se calcular a corrente e velocidade de deposição. A corrente local é dada por:

$$\begin{aligned} J_{\text{dep}} &= \mathbf{J}_{\text{dep}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \left( \mathbf{v}_T n - D \nabla n \right) \Big|_{y=0} \cdot \hat{\mathbf{n}} = -D n_x \left( \frac{\partial c}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \Big|_{y=0} \\ &= -D n_x a x^{-1/4} c'(0) \end{aligned} \quad (4.36)$$

e a velocidade de deposição média é:

$$\begin{aligned} \bar{v}_{\text{dep}} &= \frac{J_{\text{dep}}}{n_x} \\ &= -\frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{D}{L} \text{Gr}^{1/4} c'(0) \end{aligned} \quad (4.37)$$

Nas equações acima,  $\hat{\mathbf{n}}$  é o vetor normal à parede, da parede para a atmosfera, conforme pode ser visto na figura 4.1. O valor  $c'(0)$  dependerá dos diversos parâmetros envolvidos. Nota-se também que o sinal negativo na corrente e velocidade apenas indica que o sentido destas é do meio para a parede, indicando deposição.

## 4.2 Resultados para Simulação Numérica

Neste ponto, pode-se calcular a velocidade de deposição para algumas situações hipotéticas. Mantendo  $Pr=0.72$ , a temperatura da parede fixa em 293 K e a pressão no interior da contenção em  $1.10^5$  Pa, a influência da variação na temperatura no meio será analisada. No primeiro caso, a temperatura atmosférica foi mantida a 294 K; no segundo caso, a temperatura ficou em 303 K e finalmente no terceiro caso, a temperatura foi mantida a 343 K. As partículas relevantes consideradas têm diâmetro entre  $1.10^{-9}$  e  $1.10^{-5}$  m. As tabelas 4.3, 4.4 e 4.5 apresentam a velocidade de deposição, equação (4.37), normalizada por  $\left(-\frac{3\sqrt{2}L}{4Gr^{1/4}}\right)$  (isto é,  $Dc'(0)$ ). Para se calcular o valor  $c'(0)$ , e portanto a velocidade de deposição, deve-se solucionar a equação (4.25) (terceira coluna das tabelas). As colunas 4, 5 e 6 serão discutidas na próxima seção deste capítulo. Como pode-se ver nestas tabelas, a deposição é uma função do diâmetro das partículas, decrescendo para partículas maiores. É fato que a difusão é mais relevante para pequenas partículas (vide a dependência do coeficiente de difusão em função do diâmetro das partículas no primeiro apêndice, ou em referências como [1] e [14]), e espera-se que o fenômeno de termoforese se torne mais importante a medida que a diferença de temperatura entre o meio e a parede aumente. Estes fatos são claros também por uma análise destas tabelas.

Tabela 4.3 - Velocidade de deposição de aerossóis normalizada\*.

$$-\bar{v}_{dep} / \left( \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{Gr^{1/4}}{L} \right), \quad \Delta T=1K$$

$d_p$ ( $\mu m$ )	Sc	Eq.(4.25)	Eq.(4.38)	Eq.(4.42)	Eq.(4.38)+Eq.(4.42)
0.001	$2.93 \cdot 10^0$	$5.128 \cdot 10^{-6}$	$5.125 \cdot 10^{-6}$	$8.465 \cdot 10^{-9}$	$5.133 \cdot 10^{-6}$
0.005	$7.26 \cdot 10^1$	$6.865 \cdot 10^{-7}$	$6.821 \cdot 10^{-7}$	$8.359 \cdot 10^{-9}$	$6.905 \cdot 10^{-6}$
0.01	$2.86 \cdot 10^2$	$2.826 \cdot 10^{-7}$	$2.781 \cdot 10^{-7}$	$8.234 \cdot 10^{-9}$	$2.863 \cdot 10^{-7}$
0.05	$6.41 \cdot 10^3$	$3.990 \cdot 10^{-8}$	$3.556 \cdot 10^{-8}$	$7.455 \cdot 10^{-9}$	$4.302 \cdot 10^{-8}$
0.1	$2.23 \cdot 10^4$	$1.962 \cdot 10^{-8}$	$1.550 \cdot 10^{-8}$	$6.830 \cdot 10^{-9}$	$2.233 \cdot 10^{-8}$
0.5	$2.41 \cdot 10^5$	$6.557 \cdot 10^{-9}$	$3.137 \cdot 10^{-9}$	$4.974 \cdot 10^{-9}$	$8.111 \cdot 10^{-9}$
1.	$5.51 \cdot 10^5$	$4.734 \cdot 10^{-9}$	$1.806 \cdot 10^{-9}$	$4.029 \cdot 10^{-9}$	$5.835 \cdot 10^{-9}$
5.	$3.11 \cdot 10^6$	$2.565 \cdot 10^{-9}$	$5.798 \cdot 10^{-10}$	$2.444 \cdot 10^{-9}$	$3.024 \cdot 10^{-9}$

\* para se calcular a velocidade de deposição dos aerossóis presente nesta tabela foi utilizada a equação (4.37), com o valor de  $c^*(0)$  obtido pela solução das equações (4.25) (equação completa), (4.38) ("pura convecção-difusão") e (4.42) (aproximação de Batchelor e Shen, desconsiderando difusão). A última coluna representa a adição das duas últimas soluções.

Tabela 4.4 - Velocidade de deposição de aerossóis normalizada.

$$-\bar{v}_{dep} / \left( \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{Gr^{1/4}}{L} \right), \quad \Delta T=10K$$

$d_p$ ( $\mu m$ )	Sc	Eq.(4.25)	Eq.(4.38)	Eq.(4.42)	Eq.(4.38)+Eq.(4.42)
0.001	$2.96 \cdot 10^0$	$5.407 \cdot 10^{-6}$	$5.380 \cdot 10^{-6}$	$8.855 \cdot 10^{-8}$	$5.496 \cdot 10^{-6}$
0.005	$7.32 \cdot 10^1$	$7.616 \cdot 10^{-7}$	$7.155 \cdot 10^{-7}$	$8.749 \cdot 10^{-8}$	$8.030 \cdot 10^{-6}$
0.01	$2.89 \cdot 10^2$	$3.407 \cdot 10^{-7}$	$2.916 \cdot 10^{-7}$	$8.624 \cdot 10^{-8}$	$3.778 \cdot 10^{-7}$
0.05	$6.50 \cdot 10^3$	$9.320 \cdot 10^{-8}$	$3.718 \cdot 10^{-8}$	$7.836 \cdot 10^{-8}$	$1.155 \cdot 10^{-7}$
0.1	$2.27 \cdot 10^4$	$7.465 \cdot 10^{-8}$	$1.615 \cdot 10^{-8}$	$7.195 \cdot 10^{-8}$	$8.810 \cdot 10^{-8}$
0.5	$2.50 \cdot 10^5$	$5.279 \cdot 10^{-8}$	$3.231 \cdot 10^{-9}$	$5.272 \cdot 10^{-8}$	$5.595 \cdot 10^{-8}$
1.	$5.74 \cdot 10^5$	$4.288 \cdot 10^{-8}$	$1.854 \cdot 10^{-9}$	$4.285 \cdot 10^{-8}$	$4.470 \cdot 10^{-8}$
5.	$3.25 \cdot 10^6$	$2.595 \cdot 10^{-8}$	$5.940 \cdot 10^{-10}$	$2.594 \cdot 10^{-8}$	$2.653 \cdot 10^{-8}$

\* para se calcular a velocidade de deposição dos aerossóis presente nesta tabela foi utilizada a equação (4.37), com o valor de  $c^*(0)$  obtido pela solução das equações (4.25) (equação completa), (4.38) ("pura convecção-difusão") e (4.42) (aproximação de Batchelor e Shen, desconsiderando difusão). A última coluna representa a adição das duas últimas soluções.

Tabela 4.5 Velocidade de deposição de aerossóis normalizada,

$$-v_{dep} / \left( \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{Gr^{1/4}}{L} \right), \quad \Delta T = 50K$$

dp (μm)	Sc	Eq.(4.25)	Eq.( 4.38)	Eq.(4.42)	Eq.( 4.38)+Eq.(4.42)
0.001	3.06 10 <sup>0</sup>	6.480 10 <sup>-6</sup>	6.313 10 <sup>-6</sup>	5.274 10 <sup>-7</sup>	6.841 10 <sup>-6</sup>
0.05	7.58 10 <sup>1</sup>	1.131 10 <sup>-6</sup>	8.344 10 <sup>-7</sup>	5.222 10 <sup>-7</sup>	1.358 10 <sup>-6</sup>
0.01	3.00 10 <sup>2</sup>	6.816 10 <sup>-7</sup>	3.396 10 <sup>-7</sup>	5.159 10 <sup>-7</sup>	8.563 10 <sup>-7</sup>
0.05	6.85 10 <sup>3</sup>	4.766 10 <sup>-7</sup>	4.300 10 <sup>-8</sup>	4.751 10 <sup>-7</sup>	5.125 10 <sup>-7</sup>
0.1	2.44 10 <sup>4</sup>	4.404 10 <sup>-7</sup>	1.853 10 <sup>-8</sup>	4.402 10 <sup>-7</sup>	4.587 10 <sup>-7</sup>
0.5	2.89 10 <sup>5</sup>	3.307 10 <sup>-7</sup>	3.598 10 <sup>-9</sup>	3.307 10 <sup>-7</sup>	3.335 10 <sup>-7</sup>
1	6.77 10 <sup>5</sup>	2.729 10 <sup>-7</sup>	2.053 10 <sup>-9</sup>	2.729 10 <sup>-7</sup>	2.739 10 <sup>-7</sup>
5	3.91 10 <sup>6</sup>	1.646 10 <sup>-7</sup>	6.556 10 <sup>-10</sup>	1.646 10 <sup>-7</sup>	1.640 10 <sup>-7</sup>

\* para se calcular a velocidade de deposição dos aerossóis presente nesta tabela foi utilizada a equação (4.37), com o valor de  $c'(0)$  obtido pela solução das equações (4.25) (equação completa), (4.38) (“pura convecção-difusão”) e (4.42) (aproximação de Batchelor e Shen, desconsiderando difusão). A última coluna representa a adição das duas últimas soluções.

### 4.3 Desenvolvimento de expressões aditivas e correlações

Como observado acima, para que se conheça a velocidade de deposição das partículas de aerossol devido à presença de gradientes de temperatura no meio e difusão, é preciso solucionar a equação (4.25), o que apenas pode ser feito numericamente. Nota-se também que esta equação é uma função de uma série de parâmetros (Sc, Pr, Gr, K, etc.). Desta forma, é de grande interesse o estudo de algumas aproximações para esta equação. Inicialmente será considerado o caso convectivo-difusivo. Isto é, será assumido que os gradientes de temperatura provocam uma mistura dos aerossóis por meio da circulação natural, mas não haverá influência direta dos gradientes de temperatura na deposição das partículas, ou seja, a velocidade de deposição termoforética é nula. Em outras palavras,  $K=0$ . Por esta razão, esta aproximação será denominada de “pura convecção-difusão” na sequência desta tese. Nota-se que o caso de interesse neste momento é de fluxo laminar.

pois a deposição decorrente do fluxo turbulento já foi analisada no capítulo anterior. Para o caso de convecção natural laminar, a equação (4.25) com  $K=0$  se reduz a:

$$c'' + 3 Sc \zeta c' = 0 \quad . \quad (4.38)$$

Novamente esta equação requer solução numérica, pois  $\zeta$  é uma função de  $\eta$  que apenas pode ser obtida numericamente. Assim, a solução numérica da equação (4.38) fornecerá o valor de  $c'(0)$  e assim a velocidade de deposição para este modelo poderá ser calculada segundo a equação (4.37). Resultados da velocidade de deposição, decorrente da presente solução numérica da equação (4.38), para os mesmos dados do problema 4.1 descrito anteriormente, são apresentados nas tabelas 4.3 a 4.5, quarta coluna.

Nota-se a semelhança entre as equações (4.38) e (4.24):

$$\theta'' + 3 Pr \zeta \theta' = 0$$

e

$$c'' + 3 Sc \zeta c' = 0 \quad .$$

Há, entretanto, algumas importantes diferenças. A equação (4.24) é acoplada com a equação (4.23), enquanto que a equação (4.38) apenas depende da solução das equações (4.23) e (4.24), já que a solução das equações destas independe da solução de (4.38). Isto implica em que  $Pr$  afetará a solução para a velocidade do gás e para a deposição das partículas, enquanto que  $Sc$  afetará apenas a deposição de partículas. As condições de contorno associadas com a equação (4.38) são as mesmas que para a equação (4.25). Desta forma, a equação (4.38) foi solucionada pelo mesmo procedimento numérico adotado para a equação (4.25), por intermédio do programa Mathematica [113].

Considerando que a equação (4.38) é muito semelhante à equação (4.24), foi construída uma correlação para a velocidade de deposição semelhante à dada pela equação (4.31). Neste caso,  $c'(0)$  dependerá de  $Pr$  e também de  $Sc$ . Na tabela 4.6 é apresentado o valor de  $c'(0)$  para  $Pr$  variando entre 0.72 e 2.0 e  $Sc$  entre  $\sim 3.06$  ( $dp=1.10^{-9}$  m) e  $\sim 8.0 \cdot 10^6$  ( $dp=1.10^{-5}$  m). Os dados da tabela 4.6 são ajustados com uma expressão do tipo

$$c'(0) = r Pr^m Sc^n, \quad (4.39)$$

e chega-se ao seguinte ajuste:

$$c'(0) \cong 0.6517 Pr^{-0.059} Sc^{0.347}. \quad (4.40)$$

Assim, a seguinte correlação para a velocidade de deposição de partículas neste modelo é proposta:

$$\bar{v}_{dep} = 0.6144 Sc^{0.347} Pr^{-0.059} Gr^{0.25} \frac{D}{L}. \quad (4.41)$$

Nota-se que para todos os casos analisados (tabelas 4.3 a 4.5), esta aproximação é boa para partículas pequenas, mas rapidamente passa a apresentar grandes discrepâncias quando o diâmetro das partículas aumenta. Isto pode ser entendido quando recorda-se que ao se desprezar a deposição devido à termoforese (assumindo  $K=0$ ), apenas a deposição convectiva-difusiva é levada em consideração. Como esta deposição depende diretamente do coeficiente de difusão, haverá uma forte dependência com o tamanho das partículas, decrescendo rapidamente à medida que as partículas crescem.

Batchelor e Shen [114] consideraram uma aproximação interessante para as equações de deposição termoforética para fluxo forçado. Aplicando o mesmo argumento para a situação presente de convecção natural, desconsidera-se o termo difusivo na equação

(4.25) longe da parede até uma “camada limite difusiva”, e a partir deste ponto, considera-se apenas a difusão das partículas até a parede. Assumindo que esta segunda região seja pequena, admite-se que todas as partículas que ali chegam são efetivamente conduzidas por difusão à parede. Nota-se que esta é uma boa aproximação para  $Sc \gg 1$ , quando as partículas crescem e a deposição difusiva não é importante. Estes detalhes também são discutidos nas referências [1], [107] e [108]. Desta forma, ocorre a simplificação da equação diferencial de segunda ordem (4.25) para a equação diferencial de primeira ordem

$$\left(3\frac{K\Delta T\theta'}{T_\infty - \Delta T\theta}\right) c' - \frac{K\Delta T}{T_\infty - \Delta T\theta} \left[ \theta'' + \frac{\Delta T}{T_\infty - \Delta T\theta} (\theta')^2 \right] c = 0 \quad (4.42)$$

Nota-se também que esta equação requer apenas uma condição de contorno, que corresponde à concentração das partículas longe da parede.  $c(\eta \rightarrow \infty) = 1$ . A solução desta equação levará à concentração no limite da camada difusiva, muito próximo à parede. Neste ponto, assume-se que todas as partículas que ali chegam são difundidas à parede, ou seja, todas as partículas transportadas do meio para a camada limite difusiva por termoforese são depositadas na parede. Nota-se que por esta análise a concentração de partículas na parede não é igual a zero. Com esta concentração, pode-se calcular a velocidade de deposição média como sendo:

$$\begin{aligned} \bar{v}_{\text{dep}} &= \frac{1}{L} \int_0^L \frac{J_{\text{dep}}}{n_\infty} dx = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{(\mathbf{v}_T n - D \nabla n)|_{y=0}}{n_\infty} \cdot \hat{\mathbf{n}} dx = \\ &= - \frac{1}{L} \int_0^L \frac{v K}{T} \frac{\partial T}{\partial y} c(y) \Big|_{y=0} dx = \frac{v K \Delta T}{T} \theta'(\eta) \frac{a}{L} c(y) \Big|_{\eta=0} \int_0^L x^{-1/4} dx = \\ &= \frac{v K \Delta T}{T} \theta'(0) \frac{4 a L^{-1/4}}{3} c(0) \cong \frac{v K \Delta T}{T_w} \theta'(0) \frac{4}{3 L} \left( \frac{g \Delta T L^3}{4 v^2 T_\infty} \right)^{1/4} c(0) \end{aligned}$$

$$\bar{v}_{\text{dep}} = \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{Gr^{1/4}}{L} v K \frac{\Delta T}{T_w} \theta'(0) c(0) \quad (4.43)$$

Resultados da velocidade de deposição, equação (4.43), para os mesmos dados do problema 4.1 descrito acima, são apresentados nas tabelas 4.3-4.5, na quinta coluna.

Batchelor e Shen argüíram ainda que é possível construir uma solução aproximada para a equação (4.42) e, desta forma, para a equação (4.4), considerando um interessante conjunto de aproximações. Supondo-se por exemplo que  $Pr K=1$ , então, substituindo  $n=constante$   $T$ , e, desprezando os termos difusivo e de velocidade externa, a equação (4.4) fica:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T \quad , \quad (4.44)$$

que é exatamente a mesma equação de transferência de calor, equação (4.3). Assim, para  $Pr K=1$ ,

$$c(0) = \frac{n_0}{n_\infty} = \frac{T_w}{T_\infty} \quad . \quad (4.45)$$

Para  $Pr K \neq 1$ , Batchelor e Shen sugeriram

$$c(0) = \frac{n_0}{n_\infty} = \frac{T_w}{T_\infty} \left[ 1 + (1 - Pr K) \frac{\Delta T}{T_\infty} \right] \quad . \quad (4.46)$$

Nas figuras 4.4 e 4.5 mostra-se que esta aproximação funciona bem para toda a gama de variação dos parâmetros utilizados no presente estudo. Estas figuras apresentam o valor de  $c(0)$  como função de  $Pr K$ , com  $c(0)$  sendo a solução da equação (4.42) (pontos) e a aproximação dada pela equação (4.46) (linha sólida). Para todos estes casos estudados, a diferença é inferior a 1%, mas pode-se notar a partir das figuras que, à medida que a diferença de temperaturas entre o meio e a parede aumenta além dos valores estudados, isto pode não permanecer válido.

Agora que verificamos que a aproximação (4.46) é válida para os casos estudados, pode-se utilizar  $\theta'(0)$  como apresentado na tabela 4.2, e a velocidade de deposição média pode ser representada por:

$$\bar{v}_{dep} = 0.517 (\text{Pr Gr})^{1/4} \frac{\nu K}{L} \frac{\Delta T}{T_\infty} \left[ 1 + (1 - \text{Pr K}) \frac{\Delta T}{T_\infty} \right] \quad (4.47)$$

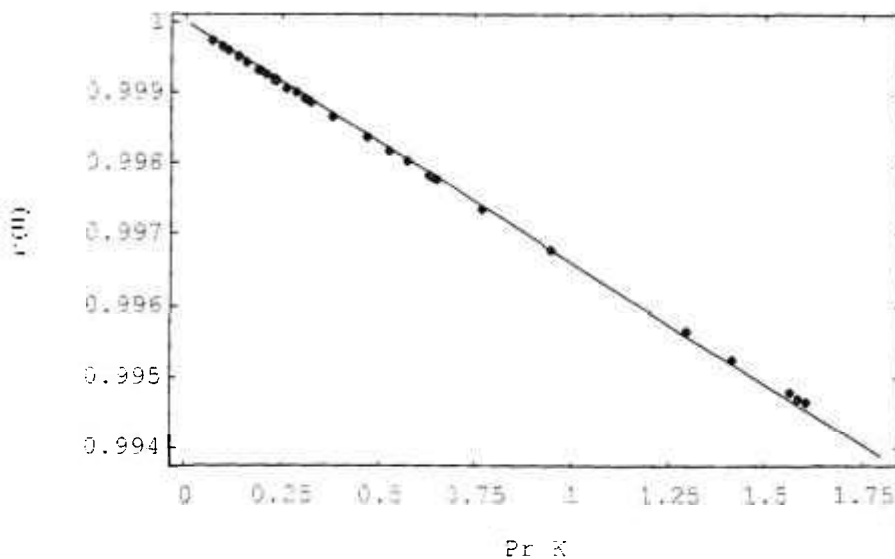


Figura 4.4 - Concentração de aerossóis na parede,  $\Delta T=1K$ ,  
solução da equação (4.42) - pontos; aproximação (4.46) - linha sólida

Dos resultados apresentados nas tabelas 4.3-4.5, nota-se que a equação (4.42) é uma boa aproximação apenas quando  $Sc \gg 1$  ou quando os gradientes de temperatura são muito grandes. Isto se deve ao fato de que para pequenas partículas (isto é, pequeno  $Sc$ ), difusão não pode ser ignorada mesmo longe da parede.

Desde que a solução convectiva-difusiva, equação (4.41) é baseada em  $K=0$ , e a equação (4.47) é baseada na hipótese de que difusão é negligível longe da parede, pode-se suspeitar que uma adição das duas aproximações poderia representar bem a solução

completa. Assim, da observação dos resultados das tabelas 4.3 a 4.5, é proposto que se considere a velocidade de deposição média dos aerossóis como sendo calculada por:

$$\bar{v}_{\text{dep}} = 0.6144 \text{ Sc}^{0.347} \text{ Pr}^{-0.059} \text{ Gr}^{0.25} \frac{D}{L} + 0.517 \left( \text{Pr Gr} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\nu K}{L} \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \left[ 1 + (1 - \text{Pr K}) \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \right] \quad (4.48)$$

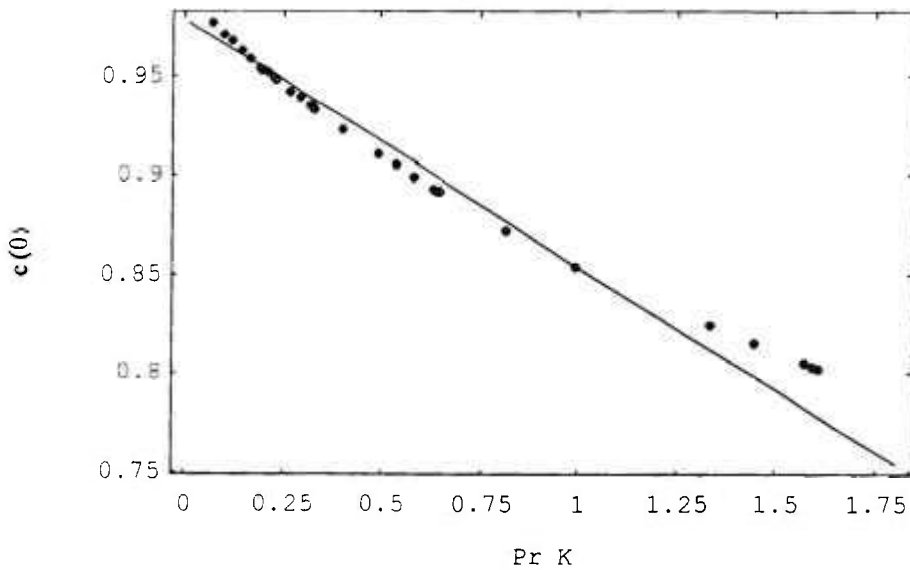


Figura 4.5 - Concentração de aerossóis na parede,  $\Delta T=50\text{K}$ , solução da equação (4.42) - pontos; aproximação (4.46) - linha sólida

Tabela 4.6 - Gradiente da concentração de partículas para vários Pr e Sc (K=0.0)

Sc	$c'(0)$			
	Pr=0.72	Pr=1.0	Pr=1.5	Pr=2.0
$3.06 \cdot 10^0$	0.9621	0.9327	0.8940	0.8650
$1.22 \cdot 10^1$	1.6386	1.5993	1.5479	1.5095
$4.86 \cdot 10^1$	2.6964	2.6400	2.5666	2.5124
$7.58 \cdot 10^1$	3.1522	3.0882	3.0052	2.9439
$1.09 \cdot 10^2$	3.5773	3.5062	3.4141	3.3462
$1.93 \cdot 10^2$	4.3598	4.2756	4.1666	4.0865
$3.00 \cdot 10^2$	5.0760	4.9797	4.8553	4.7640
$1.17 \cdot 10^3$	8.0855	7.9383	7.7488	7.6099
$4.48 \cdot 10^3$	12.7287	12.5029	12.2124	11.9998
$6.85 \cdot 10^3$	14.6815	14.4225	14.0895	13.8460
$9.63 \cdot 10^3$	16.4713	16.1818	15.8097	15.5377
$1.63 \cdot 10^4$	19.6796	19.3355	18.8933	18.5701
$2.44 \cdot 10^4$	22.5115	22.2119	21.6148	21.2465
$7.79 \cdot 10^4$	33.2868	32.7092	31.9680	31.4268
$2.15 \cdot 10^5$	46.8923	46.0779	45.0331	44.2709
$2.89 \cdot 10^5$	51.8479	50.9455	49.7893	48.9454
$3.65 \cdot 10^5$	56.1181	55.1413	53.8875	52.9735
$5.19 \cdot 10^5$	63.3038	62.1978	60.7800	59.7464
$6.77 \cdot 10^5$	69.2954	68.0820	66.5248	65.3905
$1.48 \cdot 10^6$	90.7078	89.0992	87.0388	85.5380
$3.10 \cdot 10^6$	117.591	115.467	112.749	110.771
$3.91 \cdot 10^6$	127.747	125.420	122.446	120.284
$4.72 \cdot 10^6$	136.687	134.184	130.983	128.657
$6.34 \cdot 10^6$	152.124	149.306	145.706	143.091
$7.97 \cdot 10^6$	165.353	162.264	158.312	155.444

Nota-se que não é fisicamente correto adicionar as duas expressões, pois, de uma forma ou de outra, o efeito da deposição difusiva estará sendo considerado duas vezes. Isto é feito apenas porque devido ao grande número de parâmetros envolvidos, a obtenção de expressões compactas que combinem todos os fenômenos com precisão é bastante útil,

particularmente para introdução em códigos computacionais em que o cálculo da deposição dos aerossóis é apenas um dos parâmetros sendo calculado, como é o caso do código CONTAIN, por exemplo.

As tabelas 4.3 a 4.5 fornecem um sumário detalhado dos resultados obtidos com as diversas aproximações aqui desenvolvidas. Nestas tabelas, está incluída a velocidade de deposição normalizada, com as soluções numéricas para  $c'(0)$  e  $\theta'(0)$  para cada aproximação. Para todos estes cálculos, foi utilizada a expressão original do código CONTAIN para o cálculo da constante termofóretica,  $K$  (vide o primeiro apêndice), exceto para a aproximação de “pura difusão-convecção”, onde  $K=0$ . Deve-se salientar também que estas tabelas não incluem as correlações sugeridas para as equações aproximadas, ou seja, as equações (4.41), (4.47) e (4.48).

A tabela 4.3 apresenta a velocidade de deposição dos aerossóis,  $\bar{v}_{dep}$ , normalizada por  $\left(-\frac{3\sqrt{2} L}{4 Gr^{1/4}}\right)$  na presença de uma diferença de temperatura  $\Delta T=1K$  entre a parede e o meio. Nota-se que a equação (4.43) é essencialmente proporcional ao valor de  $K$ . Além disto, para partículas  $\ll 1 \mu m$ , difusão convectiva, equação (4.38), apresenta uma melhor concordância com os resultados obtidos com a solução completa do que o obtido com a equação (4.42). Nota-se também que no limite, com  $\Delta T \rightarrow 0$ , as equações (4.38) e (4.42) predizem que não ocorrerá deposição, em desacordo com a expressão completa.

A tabela 4.4 apresenta a velocidade de deposição dos aerossóis,  $\bar{v}_{dep}$ , normalizada por  $\left(-\frac{3\sqrt{2} L}{4 Gr^{1/4}}\right)$  na presença de uma diferença de temperatura  $\Delta T=10K$  entre a parede e o meio. Nota-se que, neste caso, a equação de convecção-difusão apresenta uma melhor aproximação para a solução completa do que a equação (4.42) para partículas  $\ll 0.05 \mu m$ ,

A tabela 4.5 apresenta a velocidade de deposição dos aerossóis,  $\bar{v}_{dep}$ , normalizada por  $\left( \frac{3\sqrt{2} L}{4 Gr^{1/4}} \right)$  na presença de uma diferença de temperatura  $\Delta T=50K$  entre a parede e o meio. Nota-se que, neste caso, a equação (4.42) representará uma melhor aproximação da solução completa do que a equação de convecção-difusão para partículas  $\geq 0.01 \mu m$ .

Destes resultados fica claro que a equação (4.42) é muito boa para grandes valores de  $Sc$ , o que deveria ser esperado (desconsideração do termo difusivo, exceto muito próximo à parede). Por outro lado, a aproximação convectiva-difusiva, equação (4.38), é muito boa para pequenos valores de  $Sc$ . A adição das velocidades de deposição obtidas a partir das soluções das equações (4.38) e (4.42) apresenta resultados razoáveis para toda a gama de tamanho de partículas e temperaturas estudadas, com máximas diferenças inferiores a 30% comparadas à "solução real", dada pelas equações (4.25) e (4.37). Fica também claro que a diferença sempre cresce para o tamanho de partícula em que a deposição difusiva e termoforética têm magnitudes próximas.

Na tabela 4.7 a seguir apresenta-se a comparação das velocidades de deposição obtidas a partir da equação completa, equação (4.25), com aquelas dadas pelas aproximações de Batchelor e Schen, equação (4.47), bem como para a presente proposta de adição de expressões, equação (4.48), e também pelas expressões atualmente empregadas no código CONTAIN. Para todos os casos está sendo considerada uma parede de comprimento unitário ( $L=1$  m), uma diferença de temperatura entre o meio e a parede de 50 K, com a temperatura da atmosfera a 343 K, e  $Pr=0.72$ . Em todo o estudo realizado neste capítulo, despreza-se a deposição gravitacional. Para checar para quais tamanhos de partículas esta suposição começa a apresentar problemas, a velocidade de deposição gravitacional, considerada isoladamente, também está incluída na tabela. Para os cálculos do código CONTAIN, duas hipóteses adicionais foram assumidas: a espessura da camada limite  $\Delta=1 \cdot 10^{-5}$  m (o valor padrão do código CONTAIN), e também (o código não possui uma correlação para troca de calor por convecção natural laminar, [24]):

$$\nabla T = \frac{0.517(\text{Pr Gr})^{1/4}}{L} \Delta T \frac{T_w}{T_x} \quad (4.49)$$

Tabela 4.7 - Velocidade de deposição média dos aerossóis,  $\bar{v}_{\text{dep}}$ ;  $\Delta T=50\text{K}$  ( $\text{Pr}=0.72$ )

dp ( $\mu\text{m}$ )	Sc	K	Eq.(4.25)	Eq.(4.41)	Eq.(4.43)	CONTAIN	deposição gravitacional
0.001	$3.06 \cdot 10^0$	0.322	$1.549 \cdot 10^{-3}$	$1.215 \cdot 10^{-4}$	$1.665 \cdot 10^{-3}$	$7.009 \cdot 10^{-1}$	$7.599 \cdot 10^{-9}$
0.002	$1.22 \cdot 10^1$	0.321	$6.998 \cdot 10^{-4}$	$1.212 \cdot 10^{-4}$	$7.464 \cdot 10^{-4}$	$1.757 \cdot 10^{-1}$	$1.523 \cdot 10^{-8}$
0.004	$4.86 \cdot 10^1$	0.320	$3.320 \cdot 10^{-4}$	$1.206 \cdot 10^{-4}$	$3.741 \cdot 10^{-4}$	$4.417 \cdot 10^{-2}$	$3.058 \cdot 10^{-8}$
0.005	$7.58 \cdot 10^1$	0.319	$2.683 \cdot 10^{-4}$	$1.203 \cdot 10^{-4}$	$3.100 \cdot 10^{-4}$	$2.837 \cdot 10^{-2}$	$3.830 \cdot 10^{-8}$
0.006	$1.09 \cdot 10^2$	0.318	$2.287 \cdot 10^{-4}$	$1.200 \cdot 10^{-4}$	$2.697 \cdot 10^{-4}$	$1.977 \cdot 10^{-2}$	$4.605 \cdot 10^{-8}$
0.008	$1.93 \cdot 10^2$	0.316	$1.836 \cdot 10^{-4}$	$1.194 \cdot 10^{-4}$	$2.225 \cdot 10^{-4}$	$1.121 \cdot 10^{-2}$	$6.165 \cdot 10^{-8}$
0.01	$3.00 \cdot 10^2$	0.315	$1.597 \cdot 10^{-4}$	$1.189 \cdot 10^{-4}$	$1.961 \cdot 10^{-4}$	$7.243 \cdot 10^{-3}$	$7.737 \cdot 10^{-8}$
0.02	$1.17 \cdot 10^3$	0.307	$1.233 \cdot 10^{-4}$	$1.161 \cdot 10^{-4}$	$1.478 \cdot 10^{-4}$	$1.926 \cdot 10^{-3}$	$1.580 \cdot 10^{-7}$
0.04	$4.48 \cdot 10^3$	0.295	$1.122 \cdot 10^{-4}$	$1.122 \cdot 10^{-4}$	$1.246 \cdot 10^{-4}$	$5.750 \cdot 10^{-4}$	$3.297 \cdot 10^{-7}$
0.05	$6.85 \cdot 10^3$	0.289	$1.098 \cdot 10^{-4}$	$1.094 \cdot 10^{-4}$	$1.194 \cdot 10^{-4}$	$4.088 \cdot 10^{-4}$	$4.211 \cdot 10^{-7}$
0.06	$9.63 \cdot 10^3$	0.284	$1.077 \cdot 10^{-4}$	$1.075 \cdot 10^{-4}$	$1.155 \cdot 10^{-4}$	$3.169 \cdot 10^{-4}$	$5.166 \cdot 10^{-7}$
0.08	$1.63 \cdot 10^4$	0.275	$1.043 \cdot 10^{-4}$	$1.041 \cdot 10^{-4}$	$1.098 \cdot 10^{-4}$	$2.229 \cdot 10^{-4}$	$7.199 \cdot 10^{-7}$
0.1	$2.44 \cdot 10^4$	0.267	$1.014 \cdot 10^{-4}$	$1.013 \cdot 10^{-4}$	$1.056 \cdot 10^{-4}$	$1.773 \cdot 10^{-4}$	$9.407 \cdot 10^{-7}$
0.2	$7.79 \cdot 10^4$	0.240	$9.133 \cdot 10^{-5}$	$9.117 \cdot 10^{-5}$	$9.318 \cdot 10^{-5}$	$1.082 \cdot 10^{-4}$	$2.330 \cdot 10^{-6}$
0.4	$2.15 \cdot 10^5$	0.209	$8.009 \cdot 10^{-5}$	$7.985 \cdot 10^{-5}$	$8.088 \cdot 10^{-5}$	$8.067 \cdot 10^{-5}$	$6.671 \cdot 10^{-6}$
0.5	$2.89 \cdot 10^5$	0.199	$7.613 \cdot 10^{-5}$	$7.587 \cdot 10^{-5}$	$7.672 \cdot 10^{-5}$	$7.457 \cdot 10^{-5}$	$9.648 \cdot 10^{-6}$
0.6	$3.65 \cdot 10^5$	0.190	$7.275 \cdot 10^{-5}$	$7.248 \cdot 10^{-5}$	$7.320 \cdot 10^{-5}$	$7.000 \cdot 10^{-5}$	$1.317 \cdot 10^{-5}$
0.8	$5.19 \cdot 10^5$	0.175	$6.721 \cdot 10^{-5}$	$6.691 \cdot 10^{-5}$	$6.748 \cdot 10^{-5}$	$6.328 \cdot 10^{-5}$	$2.182 \cdot 10^{-5}$
1.	$6.77 \cdot 10^5$	0.163	$6.282 \cdot 10^{-5}$	$6.251 \cdot 10^{-5}$	$6.299 \cdot 10^{-5}$	$5.839 \cdot 10^{-5}$	$3.261 \cdot 10^{-5}$
2.	$1.48 \cdot 10^6$	0.129	$5.001 \cdot 10^{-5}$	$4.966 \cdot 10^{-5}$	$4.995 \cdot 10^{-5}$	$4.523 \cdot 10^{-5}$	$1.187 \cdot 10^{-4}$
4.	$3.10 \cdot 10^6$	0.104	$4.026 \cdot 10^{-5}$	$3.992 \cdot 10^{-5}$	$4.010 \cdot 10^{-5}$	$3.583 \cdot 10^{-5}$	$4.514 \cdot 10^{-4}$
5.	$3.91 \cdot 10^6$	0.098	$3.790 \cdot 10^{-5}$	$3.757 \cdot 10^{-5}$	$3.772 \cdot 10^{-5}$	$3.360 \cdot 10^{-5}$	$6.979 \cdot 10^{-4}$
6.	$4.72 \cdot 10^6$	0.093	$3.624 \cdot 10^{-5}$	$3.591 \cdot 10^{-5}$	$3.605 \cdot 10^{-5}$	$3.204 \cdot 10^{-5}$	$9.980 \cdot 10^{-4}$
8.	$6.34 \cdot 10^6$	0.087	$3.405 \cdot 10^{-5}$	$3.373 \cdot 10^{-5}$	$3.384 \cdot 10^{-5}$	$2.999 \cdot 10^{-5}$	$1.758 \cdot 10^{-3}$
10.	$7.97 \cdot 10^6$	0.084	$3.268 \cdot 10^{-5}$	$3.236 \cdot 10^{-5}$	$3.245 \cdot 10^{-5}$	$2.871 \cdot 10^{-5}$	$2.733 \cdot 10^{-3}$

A figura 4.6 representa as diversas correlações para cálculo da velocidade de deposição das partículas. A primeira curva do gráfico (linha sólida) representa a

velocidade de deposição obtida a partir da solução da equação completa, (4.25). Para o cálculo desta velocidade, foi utilizada a equação (4.37). A segunda curva apresentada refere-se à aproximação convectiva-difusiva, com a velocidade de deposição dada diretamente pela equação (4.41). A terceira curva representa a aproximação baseada na sugestão de Batchelor e Shen [114], equação (4.47). A quarta curva corresponde à presente proposta de aproximação para a solução completa, compreendendo a soma das equações (4.47) e (4.41), dada na equação (4.48). Além destas, apresenta-se na figura a expressão original do código CONTAIN para difusão e termoforese (como interpretada acima) e a velocidade de deposição gravitacional de aerossóis isolados. As condições física e geométrica são as mesmas utilizadas na tabela 4.7.

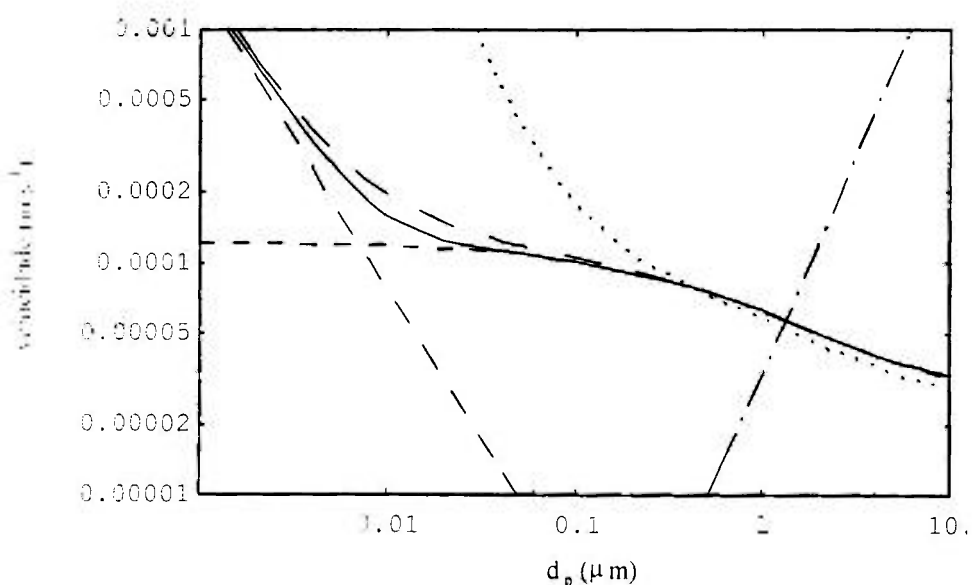


Figura 4.6 - Velocidade de deposição para  $\Delta T=50K$

Equação completa (4.25) e Eq.(4.37) (linha sólida),

Aproximação de pura difusão, eq. (4.41) (linha tracejada diagonal esquerda),

Aproximação baseada na referência [114], eq. (4.47) (linha tracejada inferior),

Aproximação sugerida por este trabalho, eq.(4.48) (linha tracejada superior),

Gravitacional, eq. (4.50) (diagonal direita, linha traço-ponto),

Expressão CONTAIN para difusão e termoforese, eq.(4.51), (linha pontilhada)

Nota-se que a deposição gravitacional,

$$\bar{v}_s = \frac{d_p^2 \rho_p g C_m}{18 \mu \chi} \quad , \quad (4.50)$$

é incluída apenas para mostrar que para partículas com diâmetro superior a  $\approx 0.5 \mu\text{m}$  (para esta diferença de temperatura entre a atmosfera e a parede), não é uma boa aproximação desprezar a deposição gravitacional. Esta é provavelmente a regra geral, já que a deposição gravitacional é basicamente independente da temperatura (há uma dependência indireta na viscosidade), e espera-se que a termoforese seja importante para partículas maiores apenas para diferenças de temperatura muito grandes, onde o limite laminar não fará sentido [109, 110].

Para partículas  $< 0.5 \mu\text{m}$  (situação em que a deposição gravitacional pode ser desprezada), a predição do código CONTAIN,

$$\bar{v}_{\text{dep}} = \left\{ \frac{D}{\Delta} + v K \frac{\nabla T}{T_w} \right\} \quad , \quad (4.51)$$

não está em bom acordo nem com a solução completa ou mesmo com as outras aproximações, como pode ser claramente visto na figura 4.6. Isto se deve a duas razões: para pequenas partículas, difusão domina, e a deposição difusiva no código CONTAIN é incorreta por assumir que  $\Delta$  é constante e independente do tamanho das partículas; para partículas maiores (onde termoforese domina), o código considera a concentração das partículas de forma errada (assume constante no meio e a mesma muito próxima à parede). Entretanto, muito embora haja um erro conceitual nesta última suposição do código, os resultados estimados pelo mesmo não diferem em muito dos resultados obtidos com a equação completa. Deve-se salientar uma vez mais, entretanto, que a modelagem laminar foi aqui incluída no cálculo da expressão do código pois o mesmo não apresenta modelagem de convecção natural laminar. Fica claro uma vez mais que a expressão

utilizada pelo código CONTAIN, como modelada atualmente, está substancialmente em erro.

A figura 4.7 apresenta as previsões do comportamento dos aerossóis dentro de uma contenção fechada. Neste caso, é assumido que o único fenômeno envolvendo os aerossóis seja a deposição, ou seja, não há presença de coagulação e/ou condensação sobre as partículas. Isto é feito com o intuito de isolar o fenômeno da termoforese e analisar isoladamente sua influência sobre as partículas. Também está sendo assumido que as expressões aqui derivadas são válidas tanto nas paredes verticais quanto nas horizontais. O caso específico em análise corresponde a um vaso cúbico de  $1000 \text{ m}^3$ , com pressão inicial de  $1 \cdot 10^5 \text{ Pa}$  e distribuição de temperatura tal que as paredes encontram-se a  $293 \text{ K}$  e a atmosfera a  $343 \text{ K}$ . A distribuição inicial dos aerossóis é log-normal<sup>16</sup>, com diâmetros entre  $1 \cdot 10^{-8}$  e  $1 \cdot 10^{-4} \text{ m}$ , com diâmetro médio inicial de  $5 \cdot 10^{-7} \text{ m}$ . A massa inicial de aerossóis é de  $250 \text{ Kg}$ . A figura 4.7 mostra a distribuição inicial dos aerossóis (linha cheia mais elevada na figura) e sua evolução após 2 horas de simulação. São considerados para efeito de comparação a modelagem proposta nesta tese, equação (4.48) implementada no código CONTAIN (linha tracejada) e a modelagem original do código CONTAIN, considerando termoforese e difusão (linha cheia, inferior). Pode-se notar, analisando a figura 4.7, que o código superestima a deposição das partículas pequenas.

Nota-se também que o código utiliza uma analogia errada com o fenômeno de transferência de calor. Batchelor e Shen foram os primeiros a propor um “salto” razoável para a concentração dos aerossóis próximo às paredes, relacionando o fenômeno de deposição com o de transferência de calor, mas levando em conta as regiões em que isto é realmente aplicável. O modelo implementado no código atualmente procura fazer o mesmo, mas é fisicamente errado já que leva em conta duplamente a difusão, e também

---

<sup>16</sup> distribuição log-normal:  $n(v) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}\sigma} \frac{1}{v} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2} \ln^2\left(\frac{v}{\varpi}\right)\right]$ , com  $v$  sendo o volume da partícula,  $N$  e  $\sigma$  sendo parâmetros ajustáveis e  $\varpi$  o diâmetro médio inicial (vide referências [1] ou [24], por exemplo)

possui uma suposição errada em relação à espessura da camada limite. Além destes problemas, o código não apresenta correlação de transferência de calor laminar.

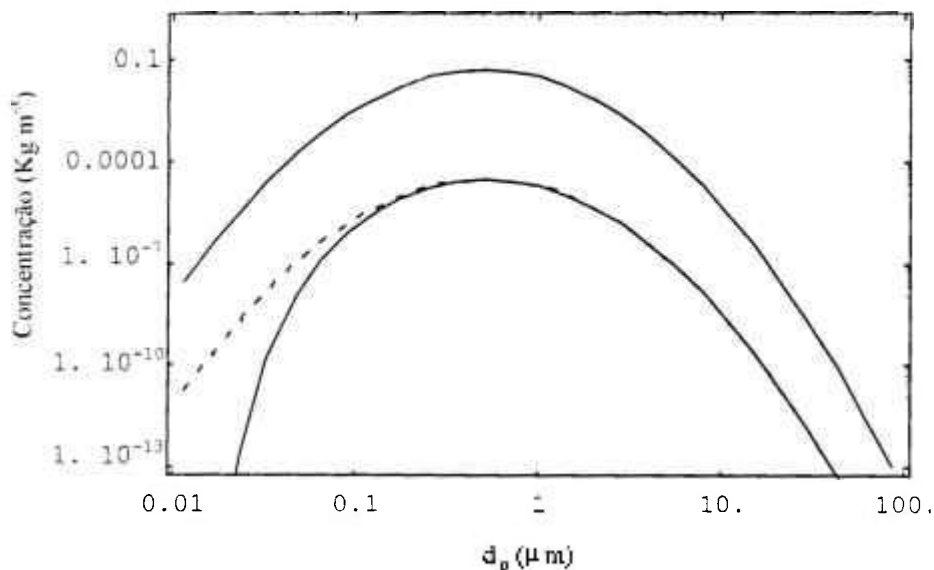


Figura 4.7 - Distribuição dos aerossóis no interior da contenção

linha sólida superior - distribuição inicial;

linha sólida inferior - CONTAIN original considerando termoforese e difusão;

linha tracejada - expressão sugerida (4.48)

#### 4.4 Discussões e sugestões para aplicação no código CONTAIN

No caso de acidentes severos em reatores nucleares, deposição de partículas dentro da contenção por mecanismos naturais pode ter um forte papel na limitação da liberação de radioatividade para o meio ambiente. Tanto a difusão quanto a termoforese das partículas são mecanismos para deposição de pequenas partículas ( $\approx 1\mu\text{m}$ ), pois a deposição gravitacional dominará para partículas maiores. Para elucidar a modelagem destes fenômenos em condições de convecção natural laminar, foi aqui apresentada a solução da equação de continuidade das partículas:

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_c + \mathbf{J}_d + \mathbf{J}_T) = 0 \quad (4.52)$$

e das equações

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_c + \mathbf{J}_d) = 0 \quad , \quad (4.53)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_c + \mathbf{J}_T) = 0 \quad , \quad (4.54)$$

que, respectivamente, correspondem às equações (4.25), (4.38) e (4.42). Nota-se que a equação (4.54) não está completa como escrita, mas se aplica apenas à camada termofóretica. Para sua completude, há ainda a necessidade da equação

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_d + \mathbf{J}_T) = 0 \quad (4.55)$$

na camada difusiva próxima à parede.

Cada uma das equações (4.25), (4.38) e (4.42), leva a uma expressão para a velocidade de deposição das partículas,  $\bar{v}_{dep}$ . A equação (4.25) corresponde à equação completa, e os resultados obtidos a partir dela deveriam ser os utilizados. Entretanto, observa-se que

$$\bar{v}_{dep} = \bar{v}_{dep}(\text{Eq.}(4.41)) + \bar{v}_{dep}(\text{Eq.}(4.47)) \quad (4.56)$$

é uma boa aproximação para toda a gama de variação dos parâmetros utilizados (Pr, Sc, K, Gr,...), com erro máximo da ordem de 30%. Nota-se que a equação (4.56) é a equação proposta (4.48). Em acordo com trabalhos recentes, nota-se também que a deposição termofóretica não é simplesmente análoga à transferência de calor, mas que a aproximação sugerida por Batchelor e Shen [114] pode ser muito útil.

Baseado nos presentes resultados, é sugerida que a taxa de deposição devido à convecção difusiva e termoforese em convecção natural laminar pode ser descrita por:

$$\begin{aligned} \bar{v}_{\text{dep}} &= \left\{ 0.6144 \text{Sc}^{0.347} \text{Pr}^{-0.059} \text{Gr}^{1/4} \frac{D}{L} + \right. \\ &\quad \left. 0.517 (\text{Pr Gr})^{1/4} \frac{\nu K}{L} \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \left[ 1 + (1 - \text{Pr K}) \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \right] \right\} \\ &= \frac{D}{L} \left\{ 0.6144 \text{Sc}^{0.347} \text{Pr}^{-0.059} \text{Gr}^{1/4} + \right. \\ &\quad \left. 0.517 (\text{Pr Gr})^{1/4} \text{Sc K} \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \left[ 1 + (1 - \text{Pr K}) \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.57)$$

Nota-se que a expressão original do código CONTAIN é dada por:

$$\begin{aligned} \bar{v}_{\text{dep}} &= \left\{ \frac{D}{\Delta} + \nu K \frac{\nabla T}{T_w} \right\} \\ &= \frac{D}{L} \left\{ \frac{L}{\Delta} + \text{Sc K} \frac{L \nabla T}{T_w} \right\} \end{aligned} \quad (4.58)$$

O desenvolvimento desta equação não é apresentado ou referenciado claramente no manual do código CONTAIN, referência [24], mas é de se supôr que também aqui o efeito difusivo está sendo implicitamente considerado duas vezes. Assim, no código CONTAIN, se a espessura da camada limite for redefinida para

$$\Delta = \frac{L}{0.6144 \text{Sc}^{0.347} \text{Pr}^{-0.059} \text{Gr}^{1/4}} \quad , \quad (4.59)$$

e o gradiente de temperatura para convecção laminar

$$\nabla T = \frac{0.517 (\text{Pr Gr})^{1/4}}{L} \Delta T \frac{T_w}{T_{\infty}} \left[ 1 + (1 - \text{Pr K}) \frac{\Delta T}{T_{\infty}} \right] \quad (4.60)$$

for incluído, o código fica consistente com a equação (4.57).

Como notado antes, a expressão utilizada para o cálculo da constante termoforética é a original do código CONTAIN, embora esta não seja a melhor disponível [1, 73]. Entretanto, não é de se esperar que alterações na formulação da constante termoforética  $K$  levem a conclusões diferentes das obtidas aqui.

Deve-se ressaltar, entretanto, que há regiões dos parâmetros estudados em que a expressão aqui proposta, equação (4.57), atinge erros da ordem de 30%. Assim, se há a necessidade de grande precisão nos cálculos de deposição, valores de  $\bar{v}_{\text{dep}}$  baseados na equação completa (4.25) devem ser utilizados (veja as tabelas 4.3 a 4.7), e também os resultados devem ser baseados na nova expressão para  $K$  [1, 73].

Outro ponto a ser ressaltado é que outros códigos para cálculo de termo fonte, tal como MELCOR [30], tem modelos para  $\bar{v}_{\text{dep}}$  que são similares aos do código CONTAIN para difusão e termoforese. Assim, uma completa revisão deve ser realizada em todos os códigos de cálculo de termo fonte para se verificar a consistência dos cálculos com os aqui apresentados.

## 5. MODELAGEM DA DEPOSIÇÃO DE AEROSSÓIS EM AMBIENTES CONDENSADORES

Na hipótese de um acidente severo em um reator refrigerado a água, a contenção nuclear poderá ser preenchida com vapor d'água e outros gases não condensáveis. Considerando que a temperatura nas paredes da contenção seja menor que o ponto de saturação do vapor, este deverá condensar nas paredes. Assume-se aqui que a condensação se desenvolverá sob a forma de um filme ou película que recobre a parede, ao invés da formação de gotas isoladas. A transferência de calor é diretamente afetada pela presença dos gases não condensáveis, conforme mostrado em [115]. Assume-se que ocorra circulação natural, que será mantida laminar, pois em situações turbulentas, termoforese e difusioforese são fenômenos não bem resolvidos [1] e, neste caso, a modelagem apresentada no capítulo 3 deste trabalho é a mais indicada. As suposições finais são com relação às paredes. Assume-se que as mesmas são planas e verticais e ainda que permanecem mais frias que o meio durante toda a sequência. Devido a esta diferença de temperatura, ocorrerá condensação e deposição das partículas, mas não evaporação e resuspensão. Como os gases irão se esfriar em contato com a parede, o movimento próximo a elas será no sentido descendente. Assim sendo, o sistema de coordenadas é posicionado com o eixo x na direção vertical e apontando para baixo, enquanto que o eixo y encontra-se na direção perpendicular à placa, apontando da placa para o meio, como pode ser visto na figura 5.1. Nesta figura também pode-se notar a presença de duas camadas limites, a primeira que corresponde ao filme líquido e uma segunda camada limite gasosa.

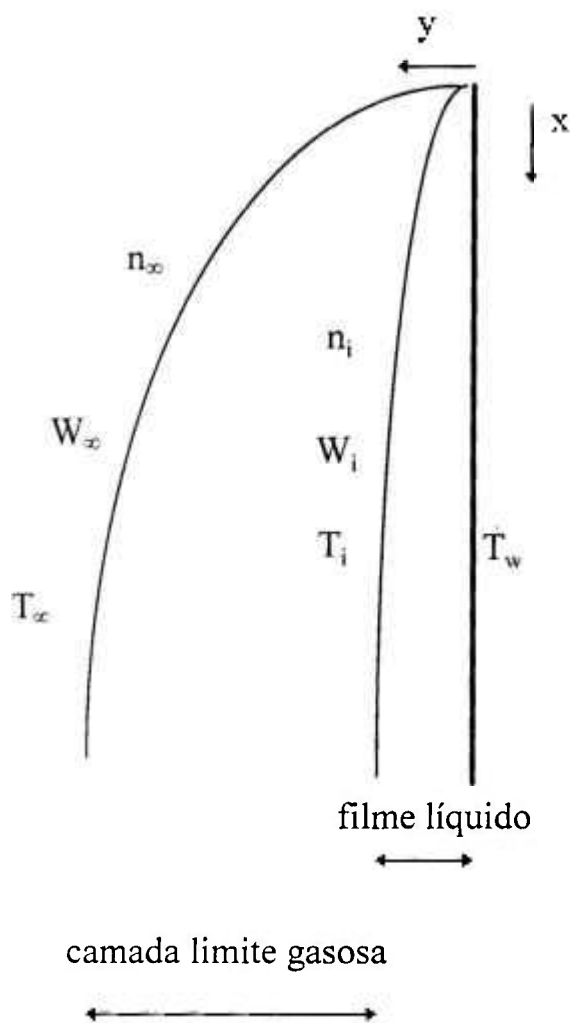


Figura 5.1 - Camadas Limite

Neste caso, há a presença de duas espécies gasosas, o vapor e uma segunda espécie não condensável, que apresentam comportamentos bem diferenciados próximo às paredes e portanto à região de interesse neste estudo, as camadas limites. Assume-se que o vapor irá se condensar, formando um filme líquido, enquanto que o gás não condensável terá velocidade média nula em todo o ambiente estudado. No desenvolvimento do trabalho será admitido ainda que um pequeno movimento de circulação está ocorrendo, e a mistura gasosa tem uma pequena velocidade na direção  $x$ . Esta velocidade, no sentido descendente, ocorre devido aos gases se resfriarem (e aumentarem consequentemente sua densidade) no contato com a parede e o filme líquido. Assim, haverá um movimento

próximo às paredes no sentido descendente, basicamente composto pelo vapor. Entretanto, assume-se que a velocidade do vapor no sentido descendente é baixa, de forma a caracterizar o escoamento como sendo laminar.

Devido à condensação do vapor, esta espécie estará se movendo constantemente (velocidade média da espécie) em direção às paredes, enquanto que os gases não condensáveis deverão permanecer com velocidade média da espécie nula nesta direção. Assim, muito próximo às paredes, haverá um gradiente de concentração do vapor e da espécie não condensável, o que influenciará na deposição das partículas.

A determinação da deposição das partículas sobre as paredes é influenciada pela convecção dos gases, difusão e ação gravitacional sobre as mesmas. Há ainda a influência dos efeitos foréticos, neste caso representados pelo gradiente de temperatura entre o meio e as paredes e também pela presença de duas espécies gasosas, uma que condensa formando o filme líquido e a segunda que é não condensável.

Dois efeitos concorrem para a deposição das partículas devido aos gradientes de concentração do vapor e da espécie não condensável. O primeiro é conhecido como fluxo de Stefan [1, 12], e é resultante do movimento hidrodinâmico da mistura, movimento este decorrente do fato de haver uma difusão entre o vapor (que está condensando e ‘caminhando’ em um sentido específico) e os gases não condensáveis (que mantêm a velocidade média da espécie nula, embora ainda haja a difusão entre as espécies). O segundo fenômeno é resultante dos impactos das moléculas das duas espécies sobre as partículas, e auxilia na deposição quando o peso molecular do vapor é maior que o dos gases não condensáveis, funcionando no sentido inverso quando o vapor é mais leve (o que é verdade na mistura vapor d’água/ar seco). Ao acoplamento destes fenômenos, que resultará no movimento médio da partícula na direção da velocidade média da mistura dos gases, dá-se o nome de difusioforese (algumas referências consideram apenas o segundo fenômeno como difusioforese, mantendo o primeiro simplesmente como ‘velocidade de

Stefan'). O terceiro apêndice apresenta uma discussão detalhada sobre a velocidade e constante difusioforética.

Para que se possa determinar a deposição das partículas, portanto, uma série de informações sobre o meio têm que ser obtidas, e as equações de conservação de Navier-Stokes devem ser solucionadas. Tradicionalmente o problema de condensação de vapor tem sido dividido em duas camadas que se comunicam na interface: um filme líquido sobre a parede e uma camada limite gasosa em que a concentração do vapor varia. Quando há apenas uma espécie envolvida (necessariamente o vapor), apenas a solução do problema no filme líquido, com certas suposições, será suficiente.

A primeira pessoa a lidar com o problema de condensação e transferência de calor associados foi Nusselt [117]. Ele considerou que o líquido estivesse com velocidade nula na parede e que o vapor se mantivesse em repouso no meio, isto é, não há atrito na interface líquido-vapor. Ele ainda assumiu que a temperatura foi mantida constante  $T_w$  na parede e  $T_{sat}$  na interface. Jakob [118] esclareceu algumas destas suposições, colocando que o gás não necessita estar completamente em repouso, mas com baixa velocidade (circulação natural, por exemplo). Seguindo Nusselt e Jakob, este assunto foi investigado extensivamente [115-124]. Estes trabalhos lidaram com algumas alterações nas condições de contorno originalmente propostas por Nusselt e também analisaram o problema admitindo a possibilidade de variação das propriedades do líquido no filme. Além disso, ao se tratar o problema na presença de gases não condensáveis, há a necessidade de se considerar também a segunda camada limite, a camada limite gasosa. Desta forma, deve-se tomar muito cuidado com a especificação das condições de contorno, particularmente na interface.

Sparrow e Eckert [115] foram os primeiros a considerar a presença de gases não condensáveis junto com o vapor por primeiro-princípios (conservação de massa, momento e energia). Eles assumiram propriedades constantes na camada gasosa e não levaram em

consideração convecção natural ou resistência interfacial. Minkowycz e Sparrow [119] levaram em conta estes efeitos e apresentaram um conjunto completo de equações acopladas a serem resolvidas nas camadas limite líquida e gasosa. Eles chegaram à conclusão de que a resistência interfacial não é relevante para o problema. Hales et al. [125], solucionaram uma aproximação para as equações de Minkowycz e Sparrow [119] e incluíram a equação de deposição de aerossóis. Eles não foram claros, entretanto, em como lidaram com a camada limite líquida, já que seus resultados para as condições de contorno na interface não concordam com os propostos por Minkowycz e Sparrow [119].

### 5.1 Equacionamento do Problema

As equações de conservação para o filme líquido podem ser escritas como [115-120]:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho_L u_L) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho_L v_L) = 0 \quad , \quad (5.1)$$

$$v_L \frac{\partial^2 u_L}{\partial y^2} = g \frac{\rho_L - \rho}{\rho_L} \quad , \quad (5.2)$$

$$k_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial y^2} = 0 \quad . \quad (5.3)$$

Na equação dos momentos acima, equação (5.2), o gradiente de pressão vertical no líquido foi igualado ao gradiente de pressão hidrostática no vapor devido à pouca espessura do filme [116].

Nesse desenvolvimento não será considerada a variação das propriedades na camada limite, exceto no termo gravitacional, em que a aproximação de Boussinesq será utilizada. Os resultados serão parcialmente verificados contra os apresentados por Hales et al. [125]. A presente proposta de solução simplificada leva a um conjunto de equações acopladas na camada limite gasosa, em complemento às equações do filme líquido. Estas equações são:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad , \quad (5.4)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{(T_\infty - T)}{T_\infty} g + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad , \quad (5.5)$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{c_{pg} - c_{pv}}{c_p} D_{av} \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad , \quad (5.6)$$

$$u \frac{\partial W}{\partial x} + v \frac{\partial W}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{av} \frac{\partial W}{\partial y} \right) \quad . \quad (5.7)$$

Nas equações acima,  $W$  é a fração de vapor, ou seja, a razão entre a densidade do vapor e da mistura. A equação (5.7) reflete a variação da concentração de vapor na camada limite.

Em uma situação como esta, a deposição dos aerossóis será favorecida pela convecção do vapor acoplada com a difusão dos aerossóis para a parede. Além disso, os efeitos foréticos devido aos gradientes de temperatura e mistura vapor/gás não condensável devem ser levados em consideração. Assim, a equação de continuidade para os aerossóis, equação (2.29), é escrita como:

$$\frac{\partial(u n)}{\partial x} + \frac{\partial(v n)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( D_p \frac{\partial n}{\partial y} \right) + \frac{\partial(v_{th} n)}{\partial y} + \frac{\partial(v_D n)}{\partial y} = 0 \quad . \quad (5.8)$$

Uma vez mais a deposição gravitacional foi desconsiderada na equação (5.8), o que limita nossa análise a partículas menores que  $\sim 0.5 \mu\text{m}$  (inclusão do termo gravitacional elimina a possibilidade de uma solução por similaridade). Nesta equação,  $D_p$  é a difusividade da partícula no meio, e a partir deste ponto será tratada simplesmente por  $D$ , enquanto que a difusividade entre o vapor e o gás não condensável será mantida como  $D_{av}$ . Nota-se que o interesse do presente trabalho é solucionar a equação (5.8). A solução para o problema de transferência de calor e massa, relatado pelas equações (5.1) a (5.7) é, entretanto, necessária para fornecer a velocidade da mistura, a temperatura e a concentração de vapor na camada limite gasosa.

Nas equações acima,

$\mathbf{u} = u \vec{i} + v \vec{j}$  é a velocidade da mistura gasosa;

$T$ ,  $T_x$  e  $T_i$  são as temperaturas do fluido, do meio longe da parede e da interface;

$\alpha = \frac{k_g}{\rho c_p}$  é a difusividade térmica [ $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ];

$\mathbf{v}_{th} = -K_T \frac{n}{T} \nabla T$  é a velocidade termoforética [ $\text{m s}^{-1}$ ];

$\mathbf{v}_D = -K_D D_{av} \nabla W$  é a velocidade difusioforética [126] [ $\text{m s}^{-1}$ ];

$K_T$  e  $K_D$  são conhecidas como constantes termoforética e difusioforética. O terceiro apêndice deste trabalho apresenta uma discussão sobre velocidade difusioforética.

As condições de contorno associadas com as equações (5.1) a (5.8) são:

- para a parede sólida,  $y=0$ :

$$u_L = v_L = 0 \quad , \quad (5.9)$$

$$\Gamma = \Gamma_w \quad ; \quad (5.10)$$

- para o meio longe da parede,  $y \rightarrow \infty$ :

$$u = v = 0 \quad , \quad (5.11)$$

$$\Gamma = \Gamma_x \quad , \quad (5.12)$$

$$W = W_\infty = \frac{\rho_{v,\infty}}{\rho} = \frac{\rho_{v,x}}{\rho_{v,x} + \rho_{a,x}} = \frac{M_v P_{v,x}}{M_v P_{v,x} + M_a P_{a,x}} \quad , \quad (5.13)$$

$$n = n_x \quad ; \quad (5.14)$$

- para a interface,  $y \rightarrow \delta(x)$ :

$u_L = u$  (a velocidade do líquido na interface é igual à velocidade hidrodinâmica da mistura gasosa nesta interface). (5.15)

$$\mu_L \frac{\partial u_L}{\partial y} = 0 \quad (\text{não há atrito na interface}) \quad , \quad (5.16)$$

$$T_L(x, \delta(x)) = T_i(x, \delta(x)) \quad (\text{não há resistência interfacial}) \quad , \quad (5.17)$$

$$W = W_i = \frac{\rho_{v,i}}{\rho} = \frac{\rho_{v,i}}{\rho_{v,i} + \rho_{a,i}} = \frac{M_v P_{v,i}}{M_v P_{v,i} + M_a P_{a,i}} \quad , \quad (5.18)$$

$$n = n_i = 0 \quad . \quad (5.19)$$

Nestas equações acima,  $P_{v,i}$  representa a pressão parcial do vapor na interface,  $P_{v,\infty}$  é a pressão parcial do vapor longe da parede,  $P_{a,i}$  representa a pressão parcial do gás não condensável na interface e  $P_{a,\infty}$  é a pressão parcial do gás não condensável longe da parede. Deve-se destacar que em decorrência da última condição de contorno relacionada acima, equação (5.19), os aerossóis são absorvidos ao entrar em contato com o filme líquido, sendo eliminados do meio para efeito de cálculo. O estudo do comportamento destas partículas no interior do filme líquido foge ao escopo do presente trabalho.

Agora, para a camada líquida, pode-se solucionar as equações (5.1)-(5.3), com as condições de contorno (5.9)-(5.10) e (5.16)-(5.17). Esta solução é simples, com a velocidade  $u_L$  obtida diretamente por uma dupla integração na equação (5.2); em seguida é obtido  $v_L$  também por integração a partir da equação (5.1). Finalmente, a equação (5.3) é solucionada também por integração (esta equação é independente). Com a aplicação das condições de contorno obtém-se:

$$u_L(x,y) = \frac{g(2\delta(x) - y)y}{2\nu_L}, \quad (5.20)$$

$$v_L(x,y) = -\frac{g y^2}{2\nu_L} \frac{d\delta(x)}{dx}, \quad (5.21)$$

$$T_L(x,y) = T_w + \frac{T_i - T_w}{\delta(x)} y. \quad (5.22)$$

As soluções indicadas acima não são completas por não se conhecer a espessura do filme líquido,  $\delta(x)$ . Para se definir a espessura desta camada, deve-se considerar dois vínculos adicionais. Primeiro assume-se que a pressão parcial do vapor na interface corresponde à pressão de saturação à temperatura da interface, isto é,  $P_{v,i} = P_{v,sat}(T_i)$ . Em segundo lugar, assume-se que a transferência de calor do vapor para o líquido é conduzida para a parede. Para clarificar este último vínculo, nota-se que a vazão de massa líquida que cruza a seção do filme na posição  $x$  é:

$$\dot{m}(x) = \rho_L \delta(x) b \bar{u}(x, y) = \rho_L \delta(x) b \frac{1}{\delta(x)} \int_0^{\delta} u(x, y) dy = \rho_L \frac{g \delta^3(x)}{3 \nu_L} b , \quad (5.23)$$

onde  $b$  é a largura da parede na direção  $z$  (perpendicular ao plano do papel na figura 5.1).

Assim, na seção  $(x+dx)$  haverá um incremento no fluxo de massa dado por:

$$d\dot{m} = \rho_L \frac{g \delta^2(x)}{\nu_L} b d\delta . \quad (5.24)$$

Nesta mesma área ( $b dx$ ), calor é transferido da fase gasosa para a líquida. Este calor é transferido principalmente por condensação, já que a condutividade térmica do gás é muito baixa. O calor transferido para o líquido é conduzido à parede. Assim, tem-se que

$$k_L \frac{\Delta T_L}{\delta(x)} b dx = dq = h_{fg} d\dot{m} , \quad (5.25)$$

onde  $h_{fg}$  é o calor latente de condensação do vapor e  $\Delta T_L = T_i - T_w$ .

Substituindo (5.24) em (5.25):

$$k_L \frac{\Delta T_L}{\delta(x)} b dx = h_{fg} \rho_L \frac{g \delta^2(x)}{\nu_L} b d\delta , \quad (5.26)$$

que pode ser rearranjada como:

$$\frac{k_L \nu_L \Delta T_L}{g h_{fg} \rho_L} dx = \delta^3 d\delta , \quad (5.27)$$

Integrando a equação acima, assumindo  $\delta(0)=0$ ,

$$\delta(x) = \left( \frac{4\nu_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} x \right)^{1/4} \quad (5.28)$$

Da equação (5.20) para a velocidade do líquido,

$$u_L(x, y) = \frac{g}{2\nu_L} y \left[ 2 \left( \frac{4\nu_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} x \right)^{1/4} - y \right] \quad (5.29)$$

Com a velocidade do líquido assim conhecida, pode-se agora obter as propriedades macroscópicas na fase gasosa e também a temperatura na interface. Começando com as transformações de similaridade tradicionais sobre as equações (5.4)-(5.7) (a equação (5.8) será transformada posteriormente pois o problema de transferência de massa e calor independe desta equação). As transformações a serem utilizadas são:

$$\Delta T = T_\infty - T_i \quad (5.30)$$

$$a = \left( \frac{g \Delta T}{4\nu^2 T_\infty} \right)^{1/4} \quad (5.31)$$

$$\eta = a x^{-1/4} (y - \delta) \quad (5.32)$$

$$u = \frac{\partial \Psi}{\partial y}; \quad v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}; \quad (5.33)$$

$$\xi(\eta) = \frac{\Psi}{4\nu_\infty x^{3/4} a} \quad (5.34)$$

$$\theta(\eta) = \frac{T - T_i}{T_\infty - T_i} \quad (5.35)$$

$$\xi(\eta) = \frac{W - W_i}{W_\infty - W_i} \quad . \quad (5.36)$$

Os detalhes destas transformações são apresentados no quarto apêndice deste trabalho. As equações finais obtidas são:

$$\zeta''' + 3\zeta\zeta'' - 2(\zeta')^2 - \theta + 1 = 0 \quad , \quad (5.37)$$

$$-3\text{Pr} \left( \zeta + \frac{\phi_{\text{cvg}} \Delta W}{3\text{Sc}} \frac{\zeta'}{\xi} \right) \theta' = \theta'' \quad , \quad (5.38)$$

$$3\text{Sc} \zeta \xi' + \xi'' = 0 \quad . \quad (5.39)$$

Agora é preciso transformar as condições de contorno, equações (5.11) a (5.19). Os detalhes destas transformações são apresentados no quarto apêndice deste trabalho. As condições de contorno de interface correspondem a  $\eta \rightarrow 0$ , enquanto que as condições para longe da parede são obtidas com  $\eta \rightarrow \infty$ . Começando com as condições de contorno para temperatura, equações (5.12) e (5.17), e utilizando a transformação (5.35):

$$\theta(\eta \rightarrow 0) = 0; \quad \theta(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad . \quad (5.40)$$

Para a concentração de vapor, equações (5.13) e (5.18), utilizando a transformação dada pela equação (5.36):

$$\xi(\eta \rightarrow 0) = 0; \quad \xi(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad . \quad (5.41)$$

Para as condições de contorno relacionadas com o campo de velocidades, primeiro considera-se a transformação dada pelas equações (5.33) e (5.34) sobre a equação (5.11):

$$\zeta'(\eta \rightarrow \infty) = 0 \quad . \quad (5.42)$$

Na interface deve-se efetuar as transformações com cautela. Em primeiro lugar, igualando a equação (5.15) à solução obtida para a camada líquida:

$$u(x, y)|_{\text{interface}} = u_L(x, y)|_{\text{interface}} = \frac{g}{2\nu_L} \delta(x)^2 \quad . \quad (5.43)$$

Agora pode-se transformar a equação acima pelas equações (5.33) e (5.34), obtendo:

$$\zeta'(\eta \rightarrow 0) = \left( \frac{k_L T_x \Delta T_L}{\nu_L h_{fg} \rho_L \Delta T} \right) \Big|_{\eta=0} \quad . \quad (5.44)$$

Detalhes desta transformação são apresentados no quarto apêndice. Finalmente, considera-se um vínculo relacionado com os gases não condensáveis, e que também afeta as condições de contorno relacionadas com velocidade do gás. A interface líquido-vapor deve ser impermeável ao gás não condensável [115, 119], ou seja, o fluxo de massa desta espécie deve ser nulo na interface:

$$\left( \dot{m}_a dx \right)_{\text{interface}} = \rho_a \left[ u_a d\delta - v_a dx \right] b = 0 \quad . \quad (5.45)$$

Por outro lado, a velocidade do gás não condensável, em ambas as direções, é nula. Isto implica em:

$$\zeta(0) = \frac{\Delta W}{3 Sc (1 - W_i)} \zeta'(0) \quad . \quad (5.46)$$

Os detalhes desta transformação são apresentados no quarto apêndice deste trabalho.

Reescrevendo agora as equações e condições de contorno para o problema de transferência de massa e calor na presença de condensação, equações (5.37) a (5.39):

$$\zeta'''' + 3 \zeta \zeta'' - 2(\zeta')^2 - \theta + 1 = 0 \quad , \quad (5.37)$$

$$-3 \text{Pr} \left( \zeta + \frac{\phi_{\text{avg}} \Delta W}{3 \text{Sc}} \xi' \right) \theta' = \theta'' \quad , \quad (5.38)$$

$$3 \text{Sc} \zeta \xi' + \xi'' = 0 \quad , \quad (5.39)$$

sujeitas às condições de contorno (5.40)-(5.42), (5.44) e (5.46)

$$\theta(\eta \rightarrow 0) = 0; \quad \theta(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad , \quad (5.40)$$

$$\xi(\eta \rightarrow 0) = 0; \quad \xi(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad , \quad (5.41)$$

$$\zeta'(\eta \rightarrow \infty) = 0 \quad , \quad (5.42)$$

$$\zeta'(\eta \rightarrow 0) = \left( \frac{k_L T_\infty \Delta T_L}{v_L h_{fg} \rho_L \Delta T_i} \right) \Big|_{\eta \rightarrow 0} \quad , \quad (5.44)$$

$$\zeta(\eta \rightarrow 0) = \frac{\Delta W}{3 \text{Sc}(1 - W_i)} \xi' \quad . \quad (5.46)$$

Para solucionar este conjunto de equações, uma última condição deve ser analisada: a temperatura na interface,  $T_i$ . Sabe-se que este é um valor entre a temperatura da parede e do meio, ambas assumidas conhecidas a princípio. A determinação exata do valor, entretanto, pode ser obtida pelo uso de mais uma relação de conservação: a massa de vapor que esta condensando e então fluindo no filme líquido. Para determinar este valor

corretamente, a massa de vapor que está condensando na interface será utilizada, conforme pode ser visto pelo balanço de massa no volume de controle da figura 5.2:

$$\left(\dot{m}_v\right)_{\text{interface}} = \rho_v \left[ u_v d\delta - v_v dx \right] b \quad , \quad (5.47)$$

mas  $u_g \approx 0$ , pois o gás não condensável tem velocidade média nula em qualquer lugar. Com isto, a velocidade do vapor na direção  $x$  é diretamente relacionada com a velocidade hidrodinâmica da mistura, ou seja,

$$u = W u_v + (1 - W) u_g = W u_v \quad . \quad (5.48)$$

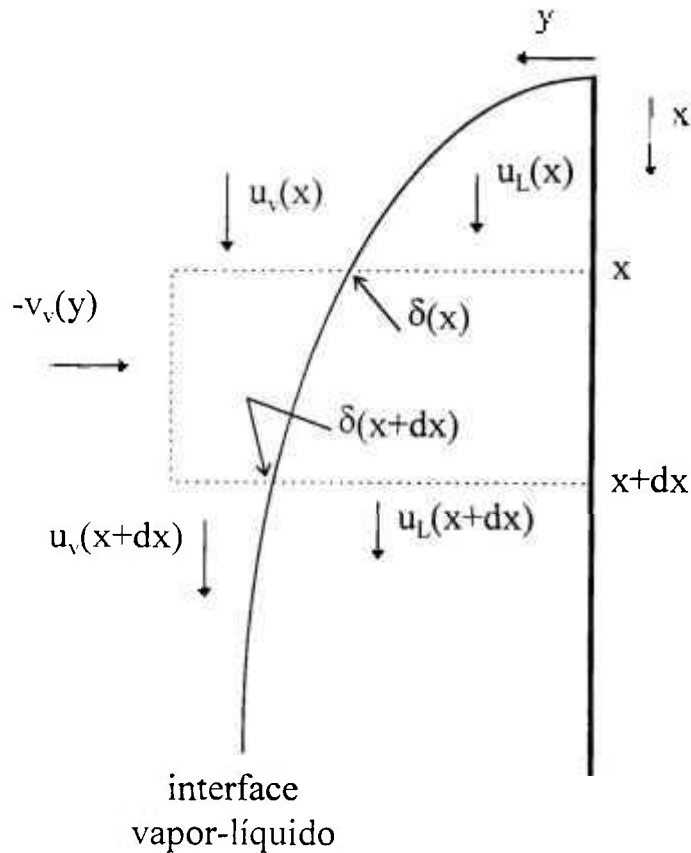


Figura 5.2 - Volume de controle na interface

Na interface, a velocidade hidrodinâmica da mistura é igual à velocidade do líquido, equação (5.15). Nesta posição, a velocidade do líquido, dada por (5.20), implica em

$$u_v = \frac{g \delta^2}{2 W v_L} \quad (5.49)$$

Por outro lado, a velocidade do vapor na direção  $y$ ,  $v_v$ , discutida no terceiro apêndice, vale

$$v_v = - \frac{D_{av}}{W(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (5.50)$$

Conseqüentemente, a massa de vapor condensando, equação (4.47) passa a:

$$(dm_v) \Big|_{interface} = \rho_v \left[ \frac{g \delta^2}{2 W v_L} d\delta + \frac{D_{av}}{W(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} dx \right] b \quad (5.51)$$

Transformando a equação acima pelas equações (5.30)-(5.36), e também utilizando o fato de que

$$W = \frac{\rho_v}{\rho} \rightarrow \rho = \frac{\rho_v}{W} \quad (5.52)$$

chega-se finalmente a:

$$(dm_v) \Big|_{interface} = \frac{\rho g \delta^2}{2 v_L} b d\delta + \frac{\rho D_{av}}{1-W_i} b a \Delta W \xi'(0) x^{-1/4} dx \quad (5.53)$$

Assumindo que este é também o incremento na massa de líquido caindo, equação (5.24):

$$\frac{\rho_L g \delta^2}{v_L} b d\delta = \frac{\rho g \delta^2}{2 v_L} b d\delta + \frac{\rho D_{av}}{1-W_i} b a \Delta W \xi'(0) x^{-1/4} dx \quad (5.54)$$

e então:

$$\left(\rho_L - \frac{\rho}{2}\right) \frac{g \delta^3(x)}{3\nu_L} = \frac{\rho \Delta W}{1 - W_i} a \frac{4}{3} x^{\frac{3}{4}} \Delta W \xi'(0) \quad (5.55)$$

que implica em

$$\delta(x) = \left( \frac{4D_{av} \nu_L \rho}{g} \frac{\Delta W}{\rho_L (1 - W_i)} a \xi'(0) \right)^{\frac{1}{3}} x^{\frac{1}{4}} \quad (5.56)$$

onde o fato de que  $\rho_L \gg \rho$  é utilizado, e despreza-se o termo relacionado com a velocidade do vapor na direção  $x$ . O valor obtido acima para  $\delta(x)$  tem a mesma dependência em  $x$  que a obtida pela equação (5.28). Igualando as equações (5.28) e (5.56):

$$\left( \frac{4\nu_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} \right)^{\frac{1}{4}} = \left( \frac{4D_{av} \nu_L \rho}{g} \frac{\Delta W}{\rho_L (1 - W_i)} a \xi'(0) \right)^{\frac{1}{3}} \quad (5.57)$$

Assim,

$$\Delta T_L = T_i - T_w = \frac{h_{fg} \rho_L g}{4\nu_L k_L} \left( \frac{4D_{av} \nu_L \rho}{g} \frac{\Delta W}{\rho_L (1 - W_i)} a \xi'(0) \right)^{\frac{4}{3}} \quad (5.58)$$

Aproximações semelhantes a estas foram sugeridas por Collier [122] e por Stephan [123]. Encontra-se também implementada no código CONTAIN por intermédio do modelo *Film tracking model* [24]. Minkowycz e Sparrow [119], entretanto, argumentam que a resistência interfacial para a transferência de calor é pequena e assumem que a temperatura na interface é a de saturação do meio (e igual à do meio, longe da parede). Soluções precisas do problema, entretanto, requerem considerações do problema fora da região do contínuo, isto é, as condições de contorno devem ser obtidas por meio da teoria

cinética dos gases [127, 128]. Para as aplicações presentes, assume-se que a equação (5.58) é o suficiente.

Este conjunto de equações acopladas é solucionado com as condições de contorno especificadas por meio de um programa escrito por intermédio do pacote Mathematica [113].

Hales et al. [125] consideraram a massa condensando por unidade de comprimento da parede como sendo

$$\left(\dot{m}_v\right)_{\text{interface}} = \frac{\rho D_{av} a x^{-1/4}}{1 - W_i} \Delta W \xi'(0) \quad (5.59)$$

Seguindo o desenvolvimento aqui apresentado, esta expressão é incorreta. Apenas para efeito de comparação de resultados, entretanto, a equação (5.59) tabelada na referência [125] estará sendo comparada com a calculada neste trabalho.

Considerando que a expressão acima fosse válida para a massa de vapor condensada, esta seria também a massa de vapor que está sendo convertida em líquido, e que carrega o calor que será transferido para a parede:

$$\left(\dot{m}_h\right)_{\text{interface}} = \frac{\lambda \rho D_{av} a x^{-1/4}}{1 - W_i} \Delta W \xi'(0) \quad (5.60)$$

Nota-se que Hales et al. [125] consideraram não apenas o calor transferido por condensação, mas também a condução de calor na fase gasosa. Neste caso, a taxa de transferência de calor é dada por:

$$\left(\dot{m}_h\right)_{\text{interface}} = \frac{\lambda \rho D_{av} a x^{-1/4}}{1 - W_{\text{wall}}} \Delta W \xi'(0) + \frac{a x^{-1/4} c_p \mu}{Pr} \Delta T \tau'(0) \quad (5.61)$$

Com isto, encerra-se o tratamento do problema clássico de transferência de calor e massa em um ambiente condensador. Nota-se uma vez mais que as equações (5.59) a (5.61) não são corretas de acordo com o desenvolvimento aqui apresentado (ou seja, não correspondem exatamente à massa e calor transferido da fase gasosa para a líquida), e serão utilizadas neste trabalho apenas para estabelecer uma comparação com o trabalho de Hales et al. [125]. Nosso próximo passo é a transformação de similaridade para a equação de conservação de aerossóis, equação (5.8). Neste caso, a relação que deve ser utilizada é:

$$c(\eta) = \frac{n}{n_s} \quad , \quad (5.62)$$

que aplicada à equação (5.8) leva a:

$$\begin{aligned} c'' - \left( 3Sc_p \zeta + \frac{Sc_p \Delta T K_T \theta'}{T_i + \Delta T \theta} + \frac{Sc_p}{Sc} K_D \Delta W \xi' \right) c' + \\ \left\{ \frac{Sc_p \Delta T K_T}{T_i + \Delta T \theta} \left[ \theta'' - \frac{\Delta T (\theta')^2}{T_i + \Delta T \theta} \right] + \frac{Sc_p}{Sc} K_D \Delta W \left[ \xi'' - K_D \Delta W (\xi')^2 \right] \right\} c = 0 \quad . \quad (5.63) \end{aligned}$$

Detalhes desta transformação são apresentados no quarto apêndice. As condições de contorno para esta equação são:

$$c(0) = 0 \quad (5.64)$$

$$c(\infty) = 1 \quad . \quad (5.65)$$

Uma vez solucionado o sistema de equações (5.37) a (5.39), a solução numérica da equação (5.63) torna-se bastante simples. Nota-se que poderia ter sido utilizada qualquer solução conhecida para o conjunto de equações que descreve o problema de condensação

de vapor na presença de um gás não condensável, inclusive admitindo a possibilidade de propriedades variáveis para os fluidos na camada limite, e então, com o conhecimento dos campos de velocidade, temperatura e concentração na camada limite gasosa, aplicar a transformação de similaridade para a equação de aerossóis.

Uma vez conhecida a concentração dos aerossóis na camada limite, pode-se calcular a corrente e a velocidade de deposição. A corrente local é dada por:

$$\begin{aligned} J_{\text{dep}} &= \mathbf{J}_{\text{dep}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \left( \mathbf{v}_{\text{total}} n - D \nabla n \right) \Big|_{y=0} \cdot \hat{\mathbf{n}} = -D n_{,y} \left( \frac{\partial c}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \Big|_{y=0} \\ &= D n_{,y} a x^{-1/4} c'(0) \quad , \end{aligned} \quad (5.66)$$

enquanto que a velocidade de deposição média vale

$$\begin{aligned} \bar{v}_{\text{dep}} &= \frac{\bar{J}_{\text{dep}}}{n_{,y}} = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{\bar{J}_{\text{dep}}}{n_{,y}} dx \\ &= \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{D}{L} Gr^{1/4} c'(0) \quad . \end{aligned} \quad (5.67)$$

Nas equações acima,  $\mathbf{v}_{\text{total}}$  é a velocidade devido à convecção, termoforese e difusioforese,  $L$  é o comprimento da parede, e  $Gr$  é o número de Grashof, dado por:

$$Gr = \left( \frac{g \Delta T L^3}{\nu^2 T_w} \right) \quad . \quad (5.68)$$

Na equação de conservação dos aerossóis transformada (5.63), tem-se os termos relacionados à convecção, difusão e movimentos difusioforético e termoforético. A seguir, a importância relativa destes fenômenos é investigada. Em primeiro lugar, considera-se

apenas os efeitos convectivo-difusivo. Assim, desconsiderando os termos foréticos, a equação (5.63) se simplifica para:

$$c'' + 3Sc_p \zeta c' = 0 \quad , \quad (5.69)$$

e a velocidade de deposição será dada pela equação (5.67), com o novo valor de  $c'(0)$  obtido pela solução da equação (5.69), com as condições de contorno (5.64) e (5.65).

Quando são incluídos os efeitos de difusioforese (mas ainda não os de termoforese), a equação (5.63) se simplifica para:

$$c'' + \left( 3Sc_p \zeta + \frac{Sc_p}{Sc} K_D \Delta W \xi' \right) c' + \frac{Sc_p}{Sc} K_D \Delta W \left[ \xi'' - K_D \Delta W (\xi')^2 \right] c = 0 \quad . \quad (5.70)$$

Neste caso, a velocidade de deposição será novamente dada pela equação (5.67), com o novo valor de  $c'(0)$  obtido pela solução da equação (5.70), com as condições de contorno (5.64) e (5.65).

O código CONTAIN, por outro lado, utiliza uma diferente modelagem para o problema, conforme já apresentado no segundo capítulo deste trabalho. Vale ressaltar uma vez mais que a aproximação utilizada atualmente no código não leva em conta a interação entre os diversos fenômenos, mas apenas vai adicionando cada velocidade de deposição, considerada em princípio isoladamente. No caso, o manual do código referencia Waldman e Schmitt [126] para o cálculo da velocidade difusioforética. Entretanto, há hipóteses duvidosas ressaltadas no manual, como por exemplo assumir que a maior parte das partículas que se encontrarão na contenção são grandes comparadas com o livre caminho médio. Neste caso específico, a modelagem apresentada por Waldman e Schmitt [126] não é considerada a melhor disponível. A velocidade de deposição difusioforética utilizada pelo código pode ser escrita como:

$$v_D = \frac{W\sqrt{M_v}}{W\sqrt{M_v} + (1-W)\sqrt{M_a}} \frac{\dot{m}_{tr}}{\rho_v A} \quad , \quad (5.71)$$

onde  $\dot{m}_{tr}$  é o fluxo de massa de vapor condensando sobre as paredes e  $A$  é a área superficial sobre a qual está ocorrendo a deposição. Outro ponto importante a ser ressaltado é que a expressão desenvolvida por Waldman e Schmitt [126] é válida para escoamentos laminares, não sendo válida no limite de regime turbulento. Por outro lado, o código CONTAIN as utiliza no regime turbulento, uma vez que não há modelagem de escoamento laminar presente no código.

## 5.2 Resultados Obtidos

O problema teste aqui proposto é baseado no apresentada por Hales et al. [125]. Eles não especificaram claramente o valor das constantes físicas utilizadas, desta forma assume-se que os valores utilizados neste trabalho não estejam muito fora dos valores por eles assumidos, exceto pelo fato de que eles se utilizaram de propriedades variáveis na camada limite. É importante também salientar que eles utilizaram algumas aproximações que não estão de acordo com o presente entendimento do problema, particularmente relacionadas à difusividade dos aerossóis, conforme será discutido na seqüência.

Neste problema deseja-se calcular a deposição dos aerossóis sobre uma parede vertical em um ambiente em que estão presentes ar e vapor (o ar seco é admitido como sendo o componente que não condensa). A temperatura do ambiente longe da parede é mantida a 373.15 K, enquanto que a parede tem sua temperatura analisada em três casos distintos: 372.594 K (correspondendo a  $\Delta T = T_\infty - T_w = 1^\circ\text{F}$ ), 370.928 K (correspondendo a  $\Delta T = T_\infty - T_w = 4^\circ\text{F}$ ) e 364.261 K (correspondendo a  $\Delta T = T_\infty - T_w = 16^\circ\text{F}$ ). A pressão parcial do vapor longe da parede foi mantida a  $1.0131 \cdot 10^5$  Pa (correspondendo a 1 atm), enquanto que a pressão parcial do ar longe da parede foi mantida a  $1.2611 \cdot 10^5$  Pa. Todas

as propriedades do sistema foram calculadas à temperatura do meio e o seu cálculo está indicado no primeiro apêndice.

Desde que o problema apresenta duas camadas limites, uma líquida e uma gasosa, há a necessidade de se estimar o valor da temperatura na interface. Desta forma, a temperatura na interface em primeira aproximação foi calculada por:

$$T_i = 0.001 T_\infty + 0.999 T_w \quad (5.72)$$

Esta primeira estimativa foi sugerido pelas simulações realizadas. Nota-se, entretanto, que este valor serve apenas como referência para uma primeira estimativa da temperatura na interface, pois durante o processo ela será recalculada pela expressão (5.58) até que ocorra a convergência.

A tabela 5.1 a seguir apresenta a solução para o problema de transferência de massa e calor. Os resultados obtidos pela presente análise para a transferência de massa e calor na interface, obtidos a partir das equações (5.59) a (5.61), foram comparados com os valores tabulados por Hales et al. [125]. Desta tabela observa-se uma boa concordância para os resultados obtidos, com máximas variações da ordem de 7.5%. Nota-se ainda que nesta tabela os resultados de Hales et al. foram convertidos do sistema inglês de unidades para o sistema internacional.

As tabelas 5.2, 5.3 e 5.4 apresentam a velocidade de deposição dos aerossóis, equação (5.67), normalizada por  $\left( \frac{3\sqrt{2} L}{4 Gr^{1/4}} \right)$  (isto é,  $D c^*(0)$ ) para uma gama de tamanhos de partículas e condições de temperatura. Além disso, os diversos mecanismos envolvidos na deposição dos aerossóis foram considerados separadamente e resultados correspondentes a convecção-difusão, equação (5.69), convecção-difusão mais termoforese, equação (5.70), e

para os quatro fenômenos combinados, equação (5.63), são apresentados. As partículas consideradas relevantes para este estudo têm diâmetro entre  $1 \cdot 10^{-9}$  e  $1 \cdot 10^{-5}$  m.

Tabela 5.1 - Fluxos de energia e vapor calculados na interface

$\Delta T$ (K)	$-\dot{m}_v x^{1/4} [10^{-4} \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}]$		$-\dot{m}_h x^{1/4} [\text{J m}^{-2} \text{ s}^{-1}]$	
	Hales et al.	presente trabalho	Hales et al.	presente trabalho
0.556	0.179	0.175	41.72	40.20
2.222	0.958	0.948	222.91	218.30
8.889	4.423	4.577	1043.05	1061.23

As tabelas 5.2-5.4 representam, respectivamente, a deposição de aerossóis em um ambiente com diferença de temperatura entre o meio e a parede de 0.556 K, 2.222 K e 8.889 K. A constante difusioforética,  $K_D$ , possui expressões distintas para os limites de grandes e pequenas partículas, conforme discutido no terceiro apêndice. Nas tabelas 5.2 e 5.3, o cálculo de deposição incluindo difusão, convecção e difusioforese (quarta coluna), considera em todo o cálculo a expressão da constante difusioforética válida para partículas pequenas. A equação completa, considerando difusão, convecção, termoforese e difusioforese (quinta coluna), considera em todo o cálculo a expressão da constante difusioforética válida para partículas pequenas, enquanto que a sexta coluna representa a correção a estes resultados considerando uma expressão mais adequada para grandes partículas (vide discussão no terceiro apêndice). Na tabela 5.4, a sexta coluna apresenta os resultados de deposição decorrentes da correção na constante difusioforética para partículas maiores quando se considera difusão, convecção e difusioforese e a sétima coluna apresenta os resultados de deposição decorrentes da correção na constante difusioforética para partículas maiores quando se considera difusão, convecção, termoforese e difusioforese.

A equação de continuidade dos aerossóis aqui utilizada, equação (5.63), é exatamente a mesma utilizada por Hales et al. [125]. É de se suspeitar, entretanto, que o cálculo da difusividade realizado por eles não está correto. Para o cálculo do coeficiente de difusão eles citam Davies [13], onde pode-se encontrar:

$$D = \frac{k_B T}{F} \quad (5.73)$$

com F sendo uma aproximação para o fator de correção de Cunningham, representado de forma geral neste texto como  $C_m$ . Por outro lado, é bem conhecido que [1]  $D = B k_B T$ , onde B é a mobilidade, dada por [1]:

$$B = \frac{C_m}{3 \pi \mu d_p} \quad (5.74)$$

Tabela 5.2 - Velocidade normalizada de deposição dos aerossóis, ( $10^{-7} \text{ s}^{-1}$ ),

$$v_{dep} / \left( \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{\text{Gr}^{1/4}}{L} \right) \cdot \Delta T = 0.556 \text{ K}$$

$d_p$ ( $\mu\text{m}$ )	Hales et al. * [125]	convecção + difusão	convecção + difusão + difusioforese	convecção + difusão + termofoforese + difusioforese	expressão corrigida para difusioforese de partículas grandes
0.001	-	39.44	39.53	39.53	-
0.0025	17.36	13.67	13.79	13.80	-
0.005	7.981	6.287	6.414	6.429	-
0.01	3.336	3.188	3.332	3.349	-
0.05	1.616	1.434	1.634	1.654	-
0.1	1.588	1.349	1.560	1.579	-
0.5	-	1.319	1.534	1.547	1.520
1.0	-	1.317	1.532	1.543	1.489
5.0	-	1.315	1.531	1.538	1.484

\* nos resultados da referência [125] foi utilizado o valor  $c' D$ , com os dados presentes na tabela 3 (da referência citada), convertidos para unidades do sistema internacional.

Tabela 5.3 - Velocidade de deposição dos aerossóis, ( $10^{-7} \text{ s}^{-1}$ ),

$$- \bar{v}_{\text{dep}} / \left( \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{\text{Gr}^{1/4}}{L} \right), \Delta T = 2.222 \text{ K}$$

$d_p$ ( $\mu\text{m}$ )	Hales et al. * [125]	convecção + difusão	convecção + difusão + difusioforese	convecção + difusão + termoforese + difusioforese	expressão corrigida para difusioforese de partículas grandes
0.001	-	41.58	41.90	41.93	-
0.0025	21.94	15.88	16.46	16.51	-
0.005	13.03	8.799	9.378	9.446	-
0.01	7.035	6.064	6.675	6.848	-
0.05	6.249	5.073	5.896	5.980	-
0.1	6.241	5.052	5.878	5.954	-
0.5	-	5.045	5.872	5.924	5.821
1.0	-	5.044	5.871	5.912	5.707
5.0	-	5.043	5.871	5.897	5.691

\* nos resultados da referência [125] foi utilizado o valor  $c' D$ , com os dados presentes na tabela 3 (da referência citada), convertidos para unidades do sistema internacional.

Desta forma, fica claro que a expressão para a difusividade apresentada por Davies [13] e utilizada por Hales et al. [125] possui inconsistências inclusive dimensionais. Ainda seguindo Davies, Hales et al. utilizaram por aproximação para o fator de Cunningham:

$$F = 1 + \frac{10^{-4}}{d_p \frac{d_p}{z}} \left[ 6.32 + 2.01 \text{Exp} \left( -2190. p \frac{d_p}{2} \right) \right], \quad (5.75)$$

com a pressão  $p$  dada em centímetros de mercúrio. A utilização da equação (5.73) com  $F$  dado por (5.75) dará erros nos valores de difusividade de várias ordens de magnitude, em relação aos valores esperados (além de dimensionalmente errados). Hales et al. [125] referenciam esta expressão em seu trabalho “corrigida”, mas não apresentam as correções realizadas ou mesmo outra referência sobre o assunto. Na tabela 5.5 encontram-se

comparadas a difusividade dos aerossóis tabeladas na referência [125] com valores que podem ser considerados padrão hoje em dia (vide referências [1], [24]),

$$D = \frac{k_B T C_m}{3\pi \mu d_p} \quad (5.76)$$

Tabela 5.4 - Velocidade de deposição dos aerossóis, ( $10^{-7} \text{ s}^{-1}$ ),

$$-v_{de} = \left( \frac{4}{3\sqrt{2}} \frac{Gr^{1/4}}{L} \right), \Delta T = 8.889 \text{ K}$$

$d_p$ ( $\mu\text{m}$ )	Hales et al. * [125]	convecção + difusão	convecção + difusão + difusioforese	convecção + difusão + termoforese + difusioforese	expressão corrigida <sup>1</sup> para difusioforese de partículas grandes	expressão corrigida <sup>2</sup> para difusioforese de partículas grandes
0.001	-	4.893	5.017	5.031	-	-
0.0025	4.484	2.462	2.663	2.687	-	-
0.005	3.643	1.888	2.140	2.172	-	-
0.01	2.359	1.750	2.027	2.061	-	-
0.05	2.321	1.723	2.006	2.036	-	-
0.1	23.19	1.723	2.005	2.033	-	-
0.5	-	1.723	2.005	2.024	1.989	1.970
1.0	-	1.723	2.005	2.020	1.951	1.936
5.0	-	1.722	2.004	2.014	1.945	1.935

\* nos resultados da referência [125] foi utilizado o valor  $c' D$ , com os dados presentes na tabela 3 (da referência citada), convertidos para unidades do sistema internacional.

\*\* este resultado, como reportado na referência [125], encontra-se uma ordem de magnitude fora dos demais resultados.

<sup>1</sup> Esta coluna corresponde aos valores corrigidos para a expressão completa, ou seja, a deposição das partículas sujeitas a difusão, convecção, difusioforese e termoforese.

<sup>2</sup> Esta coluna corresponde aos valores corrigidos para a deposição das partículas sujeitas a difusão, convecção e difusioforese.

Nota-se que os valores apresentados por Hales et al. na referência [125] não concordam com os valores padrões, mas também não concordam com os valores obtidos pelo cálculo por eles indicado, equação (5.73). Nota-se também que os valores calculados por Hales et al. subestimam em até 36% para pequenas partículas os valores padrões, diferença esta que diminui para cerca de 15% para partículas maiores. Outro importante ponto a ressaltar é que neste trabalho foi assumido que as propriedades são constantes na camada limite, enquanto que Hales et al. admitem a variação das mesmas em função da temperatura na camada limite. Assim sendo, os valores apresentados nesta tabela para os cálculos de Hales et al. [125] correspondem ao primeiro caso estudado, ou seja, diferença de temperatura entre o meio e a parede igual a 0.556 K. Estas diferenças no cálculo da difusividade explicam as grandes e inesperadas diferenças na deposição dos aerossóis obtidas entre o presente cálculo e o apresentado na referência [125].

Tabela 5.5 - Comparação da difusividade dos aerossóis

$d_p$ ( $\mu\text{m}$ )	Eq.(5.73) ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ )	Eq.(5.76) ( $\text{m}^2\text{s}^{-1}$ )
0.0025	$4.981 \cdot 10^{-7}$	$6.782 \cdot 10^{-7}$
0.005	$1.265 \cdot 10^{-7}$	$1.712 \cdot 10^{-7}$
0.01	$3.277 \cdot 10^{-8}$	$4.368 \cdot 10^{-8}$
0.05	$1.680 \cdot 10^{-9}$	$2.072 \cdot 10^{-9}$
0.1	$5.600 \cdot 10^{-10}$	$6.391 \cdot 10^{-10}$

A figura 5.3 mostra a deposição dos aerossóis como uma função dos diversos fenômenos envolvidos. Os dados para esta figura correspondem ao mesmo conjunto de dados da tabela 5.4, ou seja, diferença de temperatura entre o meio e a parede de 8.889 K. Da análise desta figura e também das tabelas 5.2-5.4, pode-se verificar que convecção-difusão é o fenômeno mais importante ocorrendo, respondendo por 85 a 99% dos valores finais, para os casos analisados. Difusioforese responde por cerca de 15%, no máximo, enquanto que termoforese responde por no máximo 2%. Nota-se também que a expressão

utilizada para o cálculo da deposição termoforética representa bem apenas partículas  $< \sim 1.0$   $\mu\text{m}$ , mas mesmo na região de partículas em que esta formulação é válida, a importância deste fenômeno atinge cerca de 15%. Entretanto, há que se levar em consideração o fato de que os gradientes de temperatura aqui estudados foram relativamente pequenos, e a importância da termoforese poderá ser maior quando este gradiente aumentar. Para partículas  $> \sim 1.0$   $\mu\text{m}$  a deposição gravitacional não pode ser negligenciada, conforme já apresentado no capítulo 4.

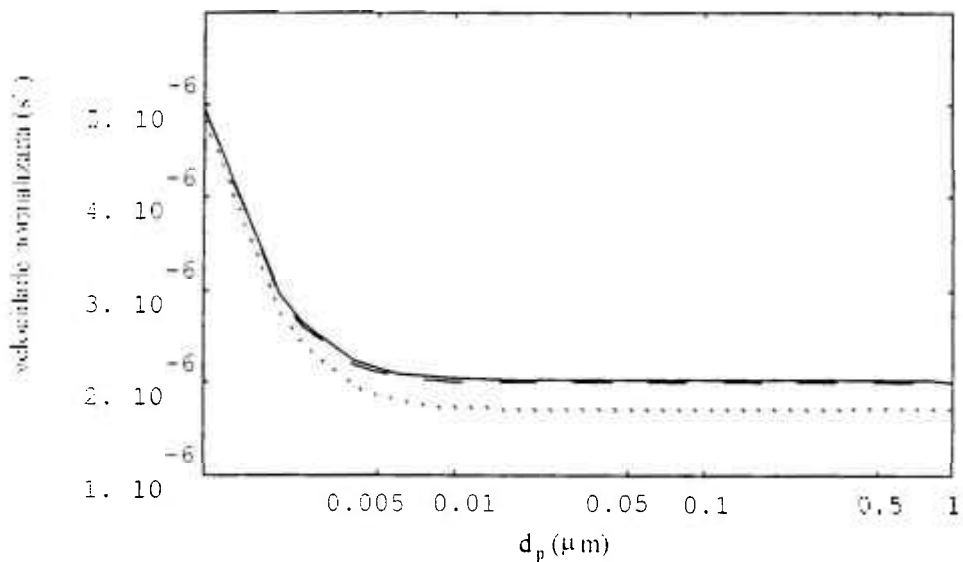


Figura 5.3 - Deposição de aerossóis devido a:  
 convecção-difusão (equação 5.69)  
 convecção-difusão mais difusioforese (equação 5.70) e  
 convecção-difusão mais difusioforese mais termoforese (equação 5.63)

### 5.3 Discussões Finais

Foram efetuados cálculos de deposição de aerossóis em um ambiente condensador dentro de uma contenção. Em primeiro lugar, foram solucionadas as equações de

conservação de massa, momento e energia no filme líquido e na camada limite gasosa. Esta solução está em bom acordo com a literatura, como pode ser visto na tabela 5.1, mesmo quando é utilizada uma aproximação simplificada com propriedades constantes na camada limite. Na seqüência, obtém-se a solução da equação de continuidade dos aerossóis na camada limite gasosa e clarifica-se a importância relativa dos fenômenos envolvidos na deposição, isto é, difusão/convecção, difusioforese e termoforese. Nota-se que, para os casos estudados, difusão-convecção é o fenômeno mais importante envolvido nesta deposição. Os cálculos difusioforéticos apresentados por Hales et al. [125] foram estendidos para partículas maiores, já que a expressão por eles utilizada é válida apenas no limite de moléculas livres. Deste cálculo estendido para partículas maiores, nota-se que o uso da expressão de Waldmann e Schmitt [126], como apresentado por Hales et al. [125], resulta em uma deposição superior à obtida com uma expressão corrigida para partículas maiores por um valor aproximado de apenas 10%. Para estas partículas, entretanto, a deposição gravitacional também deve ser considerada, e a deposição total pode ser aproximada simplesmente por difusão-convecção mais gravidade.

## 6. CONCLUSÕES FINAIS

Neste trabalho os principais fenômenos envolvidos com a deposição de aerossóis são analisados. Embora a análise tenha sido aplicada a contenções de reatores nucleares, ela é geral o bastante para ser aplicada a qualquer ambiente fechado, na presença de gradientes de temperatura e/ou concentração com os escoamentos mantidos laminares, bem como difusiva-gravitacional com os escoamentos turbulentos.

Verificou-se que o código CONTAIN, considerado a “melhor ferramenta para cálculos de contenções nucleares em acidentes severos” [24], apresenta uma modelagem equivocada para toda a análise de deposição. Em primeiro lugar, o código não realiza a distinção entre deposição laminar e turbulenta, apresentando apenas correlações para escoamentos turbulentos.

Em segundo lugar, a influência da difusão para a deposição das partículas é superestimada em todos os casos estudados com o código CONTAIN. Isto se deve à imposição de um valor fixo para a espessura da camada limite (via entrada de dados), independente do tamanho das partículas. Um modelo alternativo de deposição turbulenta, desenvolvido a partir de princípios de conservação, foi implementada no código e resultados comparativos foram apresentados nesta tese. Nota-se que, neste caso, não foram consideradas as influências de termoforese e difusioforese, já que o efeito dos gradientes de temperatura e concentração sobre as partículas em escoamentos turbulentos não é bem compreendida e modelado atualmente. A versão atual do código CONTAIN [24], entretanto, considera a influência destes fenômenos com uma modelagem adequada apenas a escoamentos laminares, o que é errado.

Em terceiro lugar, foi analisada a deposição das partículas em escoamentos laminares, sob a influência de difusão e gradientes de temperatura e difusão. A equação

completa de deposição de aerossóis foi solucionada numericamente pela primeira vez e comparada a aproximações conhecidas na literatura. Uma nova correlação para deposição convectiva-difusiva-termoforética, associada a escoamentos laminares, foi proposta para ser implementada em códigos da área nuclear.

Finalmente, foi analisada a deposição de aerossóis em ambientes condensadores. Neste caso, foi mostrado que a convecção-difusão tende a ser o fenômeno dominante, respondendo por cerca de 85% da deposição das partículas, para os casos analisados. A difusioforese responde por cerca de 15% e a influência da termoforese, especialmente para pequenos gradientes de temperatura, como os estudados aqui, é desprezível. Nota-se que, devido à condensação nas paredes, a deposição convectiva-difusiva é superior à observada no caso de presença de gradientes de temperatura, mas sem condensação.

Como foi mostrado nos capítulos anteriores, a principal componente da deposição dos aerossóis é convecção-difusão (especialmente para partículas menores que  $\sim 1 \mu\text{m}$ , onde pode-se desprezar a sedimentação gravitacional). Também foi visto que esta deposição é fortemente dependente da fluidodinâmica da contenção, variando nos casos estudados nos capítulos 3, 4 e 5. Desta forma, a filosofia do código CONTAIN e outros da área de análise de contenções nucleares em situações hipotéticas de acidentes é falha por assumir uma mesma modelagem sempre que se fala em convecção-difusão, independente de a contenção apresentar turbulência ou laminaridade, presença de gradientes de temperatura ou mesmo de concentração de ar/vapor. A filosofia correta é adicionar as correntes de deposição, levando em conta os fenômenos de interesse, e não a velocidade decorrente da consideração de cada fenômeno considerado isoladamente.

Assim, neste trabalho foram realizados estudos sobre a influência dos principais fenômenos para a deposição de partículas de aerossol. Novas expressões foram desenvolvidas e comparadas com as expressões atualmente implementadas no código nuclear CONTAIN, mostrando a utilidade do estudo de forma geral.

Há, entretanto, diversas áreas que precisam ser melhor compreendidas e modeladas. Em primeiro lugar, deve-se procurar desenvolver uma correlação para o cálculo da deposição de partículas sujeitas a convecção-difusão, termoforese e difusioforese em um ambiente com escoamento laminar. Também há a necessidade de se conhecer melhor a influência de gradientes de temperatura e concentração de uma mistura de gases para a deposição das partículas, em um ambiente com convecção turbulenta. Entretanto, neste caso, maiores estudos devem ser também realizados para um melhor entendimento dos fenômenos fundamentais como as constantes termoforética e difusioforética.

Os códigos da área nuclear que calculam termo fonte em situações de acidente devem ser revistos em vista da análise aqui apresentada e os modelos de deposição das partículas deverão ser alterados e melhor documentados, com o objetivo de facilitar a utilização consciente dos usuários.

## Apêndice 1 - Nomenclatura e propriedades dos meios envolvidos

O subíndice w se refere à parede; subíndice i se refere à interface (capítulo 5, onde há a presença do filme líquido e da camada limite gasosa); subíndice ∞ se refere ao meio, longe da parede. O subíndice v se refere a vapor; subíndice a se refere ao gás não condensável (no geral, assumido como sendo o ar seco); subíndice L se refere ao filme líquido condensado sobre as paredes. No capítulo 5, a mistura de vapor e gases não condensáveis é representada pela ausência de subíndice. O subíndice p se refere às partículas.

$$a = \left[ \frac{g (T_\infty - T_{\text{wall}})}{4 v^2 T_\infty} \right]^{1/4} \text{ - constante utilizada na transformação de similaridade;}$$

$A_j$  - área da estrutura  $j$  [ $\text{m}^2$ ];

$$c = \frac{n}{n_\infty} \text{ - concentração adimensional de aerossóis;}$$

$$C_m = 1 + \frac{2 \lambda}{d_p L} \left[ C_s + 0.4 \exp\left(\frac{-1.1 d_p}{2 \lambda}\right) \right] \text{ - fator de correção de Cunningham, segundo a referência [1];}$$

$C_s = 1.257$  - fator de correção de deslizamento, referência [1];

$C_t = 1.0$  - relacionado com o fator de acomodação térmica, referência [24];

$$D = \frac{k_B T C_m}{3 \pi \mu d_p} \text{ - coeficiente de difusão } [\text{m}^2 \text{ s}^{-1}], \text{ referência [1];}$$

$$D(y) = \frac{1}{y} \int_0^y \left[ \frac{t}{e^t - 1} \right] dt \text{ - função de Debye, tabulada na referência [108];}$$

$D_{12}$  - coeficiente de difusão binário entre o vapor e gás não condensável [ $m^2 s^{-1}$ ];

$d_p$  - diâmetro da partícula [m];

$D_{ar} = 2.6 \cdot 10^{-5} \left( \frac{T_{ar}}{298} \right)^{1.75} \frac{p}{1.013110^5}$  - coeficiente de difusão binário entre o vapor e o ar seco [ $m^2 s^{-1}$ ], referência [117];

$Dep_{j,l}$  - taxa de pseudo-deposição de aerossóis da seção l na estrutura j [ $s^{-1}$ ];

$F_{slip}$  - fator de deslizamento  $\rightarrow 1.257$ , conforme referência [1];

$\bar{G}$  - representa a conversão de gás para partícula (condensação/evaporação, [ $s^{-1}$ ]), conforme código CONTAIN;

$g$  - aceleração da gravidade [ $9.8067 m s^{-2}$ ];

$Gr = \left( \frac{g \Delta T L^3}{\nu^2 T_r} \right)$  - número de Grashof;

$h$  - coeficiente de transferência de calor [ $Kg s^{-3} K^{-1}$ ];

$h_{fg}$  - calor latente de condensação [ $J/Kg$ ];

$I_p(v, m, t)$  - taxa de condensação de aerossóis [ $m^3 s^{-1}$ ];

$J$  - corrente de partículas [ $m^2 s^{-1}$ ];

$K = \frac{1.5 C_m \left( C_t Kn + \frac{k_g}{k_p} \right)}{\chi P_{gas} \left( 1 + 3C_s Kn \right) \left( 1 + 2C_t Kn + 2 \frac{k_g}{k_p} \right)}$  - constante termoforética, referência [24];

$K(u, q|w, s)$  - núcleo de coagulação [ $m^3 s^{-1}$ ];

$\bar{K}$  - integral no núcleo de aglomeração [ $\text{m}^3 \text{Kg}^{-1} \text{s}^{-1}$ ];

$k_B$  - constante de Boltzmann, referência [1] [ $1.3807 \cdot 10^{-23} \text{J K}^{-1}$ ];

$k_e$  - constante relacionada com a turbulência da contenção [ $\text{s}^{-1}$ ];

$k_g$  - condutividade térmica do gás [ $\text{Kg m s}^{-3} \text{K}^{-1}$ ];

$k_p$  - condutividade térmica das partículas [ $\text{Kg m s}^{-3} \text{K}^{-1}$ ];

$\text{Kn} = \frac{2\lambda}{d_p}$  - número de Knudsen;

$m$  - massa dos aerossóis [ $\text{Kg}$ ];

$M_a = 28.97$  - massa molecular do ar [ $\text{Kg mol}^{-1}$ ];

$M_v = 18.02$  - massa molecular do vapor [ $\text{Kg mol}^{-1}$ ];

$\dot{m}_{tr}$  - taxa de água condensada sobre as superfícies [ $\text{Kg s}^{-1}$ ];

$n$  - concentração das partículas de aerossol [ $\text{m}^{-3}$ ];

$N_{str}$  - número de estruturas para a deposição dos aerossóis;

$\text{Nu} = \frac{hL}{k_s}$  - número de Nusselt;

$p_{gás}$  - pressão na contenção [ $\text{Pa}$ ];

$\text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}$  - número de Prandtl;

$Q_{lk}$  - concentração em massa da espécie  $k$  na  $l^{\text{ésima}}$  secção [ $\text{Kg m}^{-3}$ ];

$R(\mathbf{v}, \mathbf{m}, t)$  - taxa de remoção dos aerossóis [ $\text{s}^{-1}$ ];

$$\bar{R}_{l,k} = \sum_{j=1}^{N_{st}} Dep_{j,l} \cdot Q_{l,k} - \text{remoção das partículas, código CONTAIN};$$

$S(v, \mathbf{m}, t)$  - termo fonte dos aerossóis [ $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ ];

$\bar{S}$  - representa o termo fonte no código CONTAIN [ $\text{Kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$ ];

$Sc = \frac{v}{D}$  - número de Schmidt;

$T$  - temperatura na camada limite [K];

$T_w$  - temperatura da parede [K];

$T_\infty$  - temperatura do meio, longe da parede [K];

$\mathbf{u} = u\bar{\mathbf{i}} + v\bar{\mathbf{j}}$  - velocidade do gás [ $\text{m s}^{-1}$ ];

$v$  - volume da partícula de aerossol [ $\text{m}^3$ ];

$V$  - volume da célula [ $\text{m}^3$ ];

$\mathbf{v}_D = -K_D D_{av} \nabla W$  - velocidade difusioforética [ $\text{m s}^{-1}$ ], referência [126];

$\mathbf{v}_D = \frac{W\sqrt{M_v}}{W\sqrt{M_v} + (1-W)\sqrt{M_a}} \frac{\dot{m}_{tr}}{\rho_v A}$  - **velocidade** difusioforética [ $\text{m s}^{-1}$ ], como modelada no

código CONTAIN, referência [24];

$\mathbf{v}_d = \frac{D}{\Delta}$  - velocidade devido à convecção-difusão [ $\text{m s}^{-1}$ ], segundo modelagem do código CONTAIN [24];

$\mathbf{v}_{dep} = \mathbf{v}_s + \mathbf{v}_d + \mathbf{v}_T + \mathbf{v}_D$  - velocidade de deposição total [ $\text{m s}^{-1}$ ];

$\mathbf{v}_s = \frac{d_p^2 \rho_p g C_{nt}}{18 \mu \chi}$  - velocidade devido à sedimentação gravitacional [ $\text{m s}^{-1}$ ];

$v_T = -\frac{\nu K \nabla T}{T}$  - velocidade devido à termoforese [ $m s^{-1}$ ], referência [1];

$W = \frac{\rho_v}{\rho}$  - fração em massa do vapor na mistura;

$\alpha = \frac{k_g}{\rho c_p}$  - difusividade térmica [ $m^2 s^{-1}$ ];

$\chi$  - fator dinâmico de forma, referência [1]; utilizado igual a 1 (equivalente à forma esférica) em todo o trabalho;

$\Delta$  - espessura da camada limite, definida pelo usuário do código CONTAIN, referência [24], [m];

$\delta(x)$  - espessura do filme líquido, capítulo 5 [m];

$\phi_{cvg} = \frac{c_{pv} - c_{pg}}{c_p}$ , relação adimensional entre os calores específicos;

$\gamma_i$  - fração molar do componente  $i$  na camada limite (considerado o valor médio entre a interface e o meio longe da parede);

$\eta = a x^{-1/4} y$  - transformação de similaridade para o capítulo 4;

$\eta = a x^{-1/4} (y - \delta(x))$  - transformação de similaridade para o capítulo 5;

$\lambda = \sqrt{1.89 \cdot 10^{-4} \frac{M_a}{T_a}}$  - livre caminho médio do ar [m], referência [24];

$\mu = 3.4846 \cdot 10^{-3} \frac{p}{T}$  - viscosidade dinâmica [ $Kg m^{-1} s^{-1}$ ], referência [24];

$\nu = \frac{\mu}{\rho}$  - viscosidade cinemática [ $m^2 s^{-1}$ ];

$$\theta = \frac{T_\infty - T}{T_\infty - T_i} \text{ - temperatura adimensional;}$$

$$\rho = \rho_v + \rho_a \text{ - densidade da mistura ar-vapor, considerados gases perfeitos [Kg m}^{-3}\text{];}$$

$$\sigma = \frac{1}{(W_i + \Delta W \xi) + \sqrt{M_a/M_v}} \text{ - constante difusioforética;}$$

$$\xi = \frac{W_\infty - W}{W_\infty - W_i} \text{ - concentração de vapor adimensional;}$$

$\psi$  - função de fluxo, relacionada à velocidade do fluido:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}; \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x};$$

$\zeta$  - relacionado com a velocidade e com a função de fluxo:

$$\zeta(\eta) = \frac{\psi}{4 \nu a x^{3/4}} \quad \dots$$

## Apêndice 2 - Transformação de similaridade para o capítulo 4

Neste apêndice serão realizadas as transformações de similaridade para a equação de conservação de partículas estudada no capítulo 4 deste trabalho. Iniciando com a equação (4.8):

$$u \frac{\partial n}{\partial x} + v \frac{\partial n}{\partial y} = D \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} - \frac{\partial(v_{th} n)}{\partial y} \quad (A.1)$$

Substituindo nesta equação a aproximação para a velocidade termoforética e também utilizando a definição da concentração adimensional das partículas,

$$c = \frac{n}{n_s} \quad (A.2)$$

tem-se que:

$$u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + v K \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial T}{T} c \right)$$

e, redistribuindo a última derivada:

$$u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{v K}{T} \left[ \frac{\partial T}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial y} + c \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{c}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial y} \right)^2 \right] \quad (A.3)$$

Para adimensionalizar a equação acima, utilizam-se as seguintes transformações:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} = 4va^2 x^{1/2} \zeta'(\eta) \quad ; \quad (\text{A.4})$$

$$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = va x^{-1/4} (\eta \zeta' - 3\zeta) \quad ; \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = -\frac{\eta}{4x} c'(\eta) \quad ; \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{\partial c}{\partial y} = \frac{\partial c}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\eta}{y} c'(\eta) \quad ; \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\eta}{y} c'(\eta) \right) = \frac{\eta^2}{y^2} c''(\eta) \quad ; \quad (\text{A.8})$$

$$T = T_x - \theta \Delta T \quad ; \quad (\text{A.9})$$

$$\Delta T = (T_x - T_w) \quad ; \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = -\Delta T \frac{\partial \theta}{\partial y} = -\frac{\Delta T \eta}{y} \theta' \quad ; \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = -\Delta T \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\eta \theta'}{y} \right) = \frac{\Delta T \eta^2}{y^2} \theta'' \quad ; \quad (\text{A.12})$$

Com todas estas alterações, a equação (A.3) passa a:

$$4va^2 x^{1/2} \zeta' \left( -\frac{\eta}{4x} c' \right) + va x^{-1/4} (\eta \zeta' - 3\zeta) \left( \frac{\eta}{y} c' \right) = D \frac{\eta^2}{y^2} c'' + \left\{ \frac{Kv}{T_x - \Delta T \theta} \left[ -\frac{\eta}{y} c' \frac{\Delta T \eta}{y} \theta' - c \frac{\Delta T \eta^2}{y^2} \theta'' - \frac{c}{T_x - \Delta T \theta} \left[ \frac{\Delta T \eta}{y} \theta' \right]^2 \right] \right\}$$

que implica em:

$$-va^2 x^{-1/2} \eta \zeta' c' + v \left( ax^{-1/4} \right)^2 (\eta \zeta' - 3\zeta) (c') =$$

$$D \left( ax^{-1/4} \right)^2 c'' - \frac{Kv\Delta T \left( ax^{-1/4} \right)^2}{T_\infty - \Delta T \theta} \left\{ c'\theta' + c\theta'' + \frac{c\Delta T}{T_\infty - \Delta T \theta} (\theta')^2 \right\}$$

⇓

$$-v\eta^3 \zeta' c' + v\eta^2 (\eta \zeta' - 3\zeta) c' =$$

$$D\eta^2 c'' - \frac{Kv\Delta T \eta^2}{T_\infty - \Delta T \theta} \left\{ c'\theta' + c\theta'' + \frac{c\Delta T}{T_\infty - \Delta T \theta} (\theta')^2 \right\}$$

⇓

$$c'' + Sc \left[ 3\zeta - \frac{K\Delta T \theta'}{T_\infty - \Delta T \theta} \right] c' - \frac{ScK\Delta T}{T_\infty - \Delta T \theta} \left[ \theta'' + \frac{\Delta T}{T_\infty - \Delta T \theta} (\theta')^2 \right] c = 0 \quad (A.13)$$

Nota-se que a equação reportada por Nazaroff e Cass, referência [110] e equação (4.35) deste trabalho, difere da equação acima por duas simplificações adicionais realizadas por eles:

- eles consideraram apenas casos quando  $\Delta T \ll T_\infty \Rightarrow \frac{1}{T_\infty - \Delta T \theta} \approx \frac{1}{T_\infty}$  ;
- eles desconsideraram os termos  $c\theta''$  e  $\frac{c(\Delta T)^2}{T_\infty - \Delta T \theta} (\theta')^2$ , utilizando argumentos sobre o tamanho das partículas de interesse e também sobre a espessura da camada limite.

Nota-se também que a aproximação de Batchelor e Shen, referência [114] e equação (4.42), pode ser realizada na equação acima simplesmente desconsiderando o termo difusivo,  $c''$ .

### Apêndice 3 - Velocidade e constante difusioforética

Partículas de aerossóis suspensas em uma mistura gasosa experimentam uma força devido à difusão de moléculas gasosas. O movimento destas partículas, com respeito à velocidade molar ou hidrodinâmica da mistura, é conhecido como movimento difusioforético. Este fenômeno foi discutido em Waldman e Schmitt [126], Cipolla et al. [127], Ivchenko et al. [128], entre outras referências. Neste apêndice serão discutidos dois limites importantes, em primeiro lugar a velocidade difusioforética como definida para pequenas partículas, no limite de moléculas livres. Este resultado foi derivado por Waldman e Schmitt [126]. No segundo limite, válido para partículas maiores (região de deslizamento), será discutida uma expressão desenvolvida por Loyalka [129] e também outras aproximações, como a desenvolvida por Kramers-Kistemaker [132] e uma interpolação entre estas expressões será sugerida.

Para iniciar o estudo, deve-se elucidar detalhes sobre a velocidade do vapor, do gás não condensável, a velocidade hidrodinâmica da mistura e também a velocidade das partículas. A velocidade hidrodinâmica da mistura, na direção perpendicular à parede, é dada por:

$$v = W v_v + (1 - W) v_a; \quad W = \frac{\rho_v}{\rho}; \quad (1 - W) = \frac{\rho_a}{\rho} . \quad (\text{A.14})$$

Pode-se agora calcular a velocidade de cada componente da mistura gasosa. Assumindo que um gás esteja se difundindo contra o outro, tem-se [1]:

$$v_v = v - \frac{D_{av}}{W} \frac{\partial W}{\partial y}; \quad v_a = v - \frac{D_{av}}{(1 - W)} \frac{\partial (1 - W)}{\partial y} = v + \frac{D_{av}}{(1 - W)} \frac{\partial W}{\partial y} , \quad (\text{A.15})$$

onde  $D_{av}$  é a difusividade entre o vapor e o gás não condensável. Por outro lado, o gás não condensável tem velocidade média nula, ou seja,  $v_a=0$  em todo domínio. Isto implica em que a velocidade hidrodinâmica do gás,  $v$ , é dada por

$$v = -\frac{D_{av}}{(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (A.16)$$

e a velocidade média do vapor,  $v_v$ , é conseqüentemente dada por

$$v_v = -\frac{D_{av}}{W(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (A.17)$$

Para se definir a velocidade das partículas no limite de moléculas livres, utiliza-se a proposta de Waldman e Schmitt [126]. Neste caso, as partículas de aerossóis são assumidas esféricas e vale a seguinte relação:

$$v_{spt} = \varepsilon_1 v_1 + \varepsilon_2 v_2; \quad \varepsilon_i = \frac{\left(1 + \frac{\pi}{8} a_i\right) \frac{n_i}{n} \sqrt{M_i}}{\left(1 + \frac{\pi}{8} a_1\right) \frac{n_1}{n} \sqrt{M_1} + \left(1 + \frac{\pi}{8} a_2\right) \frac{n_2}{n} \sqrt{M_2}} \quad (A.18)$$

onde  $\varepsilon_i$  vem da teoria de cinética dos gases;  $M_i$  é a massa molecular do gás respectivo;  $n_i$  é a concentração molar do gás respectivo;  $i=1 \rightarrow$  vapor;  $i=2 \rightarrow$  gás não condensável;  $a_i$  é o coeficiente de reflexão térmica para o gás  $i$ . Na sequência será assumido que  $a_1=a_2$ , o que simplificará a equação resultante.

Assim, definindo a velocidade difusioforética,  $v_D$  como sendo:

$$v_D = v_{spt} - v \quad (A.19)$$

tem-se que

$$v_D = \varepsilon_1 v_1 + \varepsilon_2 v_2 - v = \varepsilon_1 v_1 - v = -\frac{\varepsilon_1 D_{av}}{W} \frac{\partial W}{\partial y} + \frac{D_{av}}{(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (\text{A.20})$$

e. utilizando ainda a hipótese de que  $a_1=a_2$ , chega-se finalmente a:

$$v_D = -\frac{D_{av}}{W(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \left( \frac{n_1 \sqrt{M_1}}{n_1 \sqrt{M_1} + n_2 \sqrt{M_2}} - W \right) \quad (\text{A.21})$$

Deve-se uniformizar o tratamento, substituindo a concentração molar,  $n_i$ , pela concentração em massa,  $W$ :

$$W = \frac{\rho_v}{\rho} = \frac{n_v M_v}{n_v M_v + n_a M_a} = \frac{\frac{n_v}{n} M_v}{\frac{n_v}{n} M_v + \frac{n_a}{n} M_a} = \frac{\gamma M_v}{\gamma M_v + (1-\gamma) M_a}$$

onde  $\gamma$  é a fração molar do vapor e  $(1-\gamma)$  é a fração molar dos gases não condensáveis. Há uma relação específica entre os gases 1 e 2 e os sub-índices v e a. A partir deste ponto, serão utilizados exclusivamente os sub-índices v e a. Da relação acima, ainda pode-se definir:

$$W = \frac{1}{1 + \left( \frac{1}{\gamma} - 1 \right) \frac{M_a}{M_v}} \quad ; \quad \gamma = \frac{1}{1 + \left( \frac{1}{W} - 1 \right) \frac{M_a}{M_v}} \quad (\text{A.22})$$

Com este conjunto de transformações, pode-se reescrever a velocidade difusioforética para pequenas partículas, equação (A.21), como:

$$\begin{aligned}
v_D &= -\frac{D_{av}}{W(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \left( \frac{\gamma \sqrt{M_c}}{\gamma \sqrt{M_v} + (1-\gamma) \sqrt{M_a}} - W \right) = \\
&= -\frac{D_{av}}{W(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \left( \frac{\frac{W M_a}{W M_a + (1-W) M_v} \sqrt{M_v}}{\frac{W M_a}{W M_a + (1-W) M_v} \sqrt{M_v} + \frac{(1-W) M_v}{W M_a + (1-W) M_v} \sqrt{M_a}} - W \right) = \\
&= -\frac{D_{av}}{(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \left[ \frac{\sqrt{M_a}}{W \sqrt{M_a} + (1-W) \sqrt{M_v}} - 1 \right] = \\
&= \frac{D_{av}}{(1-W)} \frac{\partial W}{\partial y} \left[ \frac{(1-W) (\sqrt{M_v} - \sqrt{M_a})}{W (\sqrt{M_a} - \sqrt{M_v}) + \sqrt{M_v}} \right] \rightarrow \\
\rightarrow v_D &= \frac{D_{av}}{W - \frac{\sqrt{M_v}}{\sqrt{M_v} - \sqrt{M_a}}} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (A.23)
\end{aligned}$$

Considerando a velocidade difusioforética como sendo dada por

$$v_D = -K_D D_{av} \frac{\partial W}{\partial y} \quad (A.24)$$

então o valor da constante termoforética é dada por:

$$K_D = \frac{1}{W - \frac{\sqrt{M_v}}{\sqrt{M_v} - \sqrt{M_a}}} \quad (A.25)$$

Este desenvolvimento, apresentado acima, foi baseado em Waldman e Schmitt [126]. Para partículas grandes, no limite conhecido por deslizamento, pode-se considerar a velocidade difusioforética como sendo dada por:

$$v_D = -K_{D,\gamma} D_{av} \frac{\partial \gamma}{\partial y}, \quad (\text{A.26})$$

onde  $\gamma$  é a fração molar do vapor;  $K_{D,\gamma}$  representa a constante difusioforética, que possui uma complexa dependência nas propriedades dos gases envolvidos, das interações superficiais dos mesmos, além do número de Knudsen,  $Kn = \frac{2\lambda}{d_p}$ , com  $\lambda$  sendo o livre caminho médio das moléculas. Pode-se converter a equação (A.26) para a formulação utilizada no desenvolvimento de todo este trabalho apenas com alterações em  $\gamma$  e em  $K_{D,\gamma}$ . Para partículas pequenas, pode-se converter a equação (A.23) para uma dependência em termos da fração molar, obtendo:

$$v_D = - \frac{\frac{\sqrt{M_a}}{\sqrt{M_v}} \frac{M_v}{M} D_{av} \frac{\partial \gamma}{\partial y}}{\gamma \frac{\sqrt{M_a}}{\sqrt{M_v}} + (1-\gamma)} \quad (\text{A.27})$$

com  $M = \gamma M_v + (1-\gamma) M_a$ . Por outro lado, para partículas grandes (limite de deslizamento), tem-se que

$$K_{D,\gamma} = \sigma_{12}^{(v)}, \quad (\text{A.28})$$

onde  $\sigma_{12}^{(v)}$  é o coeficiente de difusão de deslizamento (*diffusion slip coefficient*), como discutido extensivamente em Loyalka [129], Lang e Loyalka [130] e Ivchenko et al. [128]. A expressão explícita para  $\sigma_{12}^{(v)}$  é complicada, mas pode ser expressa como:

$$\sigma_{12}^{(1)} = \left\{ \frac{1}{2} \frac{\left[ \left( \frac{m_2}{m} \right) - \frac{z_1}{2} \right] \alpha_1 \varepsilon - \left[ \left( \frac{m_1}{m} \right) + \frac{z_2}{2} \right] \alpha_2}{\gamma_1 \varepsilon + \gamma_2} + \frac{(2 - \alpha_1) \gamma_1 \varepsilon + (2 - \alpha_2) \gamma_2 \left[ \left( \frac{m_2}{m} \right) - \frac{z_1}{4} \right] \left( \frac{m_1}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \alpha_1 - \left[ \left( \frac{m_1}{m} \right) + \frac{z_2}{4} \right] \alpha_2}{\gamma_1 \varepsilon + \gamma_2} \right\} \left( \frac{m_1}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \gamma_1 \alpha_1 + \gamma_2 \alpha_2 \quad (\text{A.29})$$

Nesta equação,  $\varepsilon = \frac{b_1}{b_{-1}}$ ,  $z_1 = \gamma_1 \left( \frac{2k_B T}{m_1} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{d_1}{D_{12}}$ ,  $z_2 = \gamma_2 \left( \frac{2k_B T}{m_2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{d_{-1}}{D_{12}}$ , onde, em uma aproximação de primeira ordem (veja Loyalka [129] e também Chapman e Cowling, referência [131]):

$$b_1 = \gamma \left( \frac{2}{3} + \frac{M_1}{M_2} A \right) + \gamma_2 \left( \frac{E}{2\mu_2} + \frac{2}{3} - A \right) \left( p \Delta_a \right) \quad (\text{A.30})$$

$$b_{-1} = \gamma_2 \left( \frac{2}{3} + \frac{M_2}{M_1} A \right) + \gamma_1 \left( \frac{E}{2\mu_1} + \frac{2}{3} - A \right) \left( p \Delta_b \right) \quad (\text{A.31})$$

$$d_1 = 2M_1^{\frac{1}{2}} M_2 C \left\{ \gamma_1 \gamma_2 \left[ 4AM_1 + 3(M_2 - M_1) \right] + \gamma_2^2 P_2 \right\} \frac{2D_{12} \left( \frac{m_1 + m_2}{2k_B T} \right)^{\frac{1}{2}}}{\gamma_1^2 Q_1 + \gamma_2^2 Q_2 + \gamma_1 \gamma_2 Q_{12}} \quad (\text{A.32})$$

$$d_{-1} = -2M_2^{\frac{1}{2}} M_1 C \left\{ \gamma_1 \gamma_2 \left[ 4AM_2 + 3(M_1 - M_2) \right] + \gamma_1^2 P_1 \right\} \frac{2D_{12} \left( \frac{m_1 + m_2}{2k_B T} \right)^{\frac{1}{2}}}{\gamma_1^2 Q_1 + \gamma_2^2 Q_2 + \gamma_1 \gamma_2 Q_{12}} \quad (\text{A.33})$$

$$P_1 = \frac{M_1 E}{\mu_1} \quad (\text{A.34})$$

$$P_2 = \frac{M_2 E}{\mu_2} \quad (\text{A.35})$$

$$Q_1 = P_1(6M_2^2 + 5M_1^2 - 4M_1^2B + 8M_1M_2A) \quad (\text{A.36})$$

$$Q_2 = P_2(6M_1^2 + 5M_2^2 - 4M_2^2B + 8M_1M_2A) \quad (\text{A.37})$$

$$Q_{12} = 3(M_1 - M_2)^2(5 - 4B) + 4M_1M_2A(11 - 4B) + 2P_1P_2 \quad (\text{A.38})$$

e A, B, C e E são funções das forças intermoleculares, dados explicitamente na referência [131], citado na referência [130].

Deve-se notar que, para moléculas que se comportam segundo uma maxwelliana, e também assumindo reflexão difusiva, Kramers-Kistemaker [132] apresentam a seguinte expressão para  $\sigma_{12}^{(v)}$ :

$$\sigma_{12,KK}^{(v)} = \frac{\left(\frac{m_2}{m}\right)\left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{m_1}{m}\right)}{\left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{\frac{1}{2}} \gamma_1 + \gamma_2} \quad (\text{A.39})$$

A expressão (A.39) é exatamente a mesma que a expressão (A.27), válida para o limite de moléculas livres. A expressão dada por (A.28) é mais precisa que a expressão (A.39), conforme discutido em [129] e [130]. Nota-se também que o código CONTAIN utiliza uma expressão baseada em (A.39).

O uso da expressão (A.28) ao invés da simplificada (A.39), entretanto, é muito mais complexo. Por esta razão, a expressão (A.39) é utilizada, mas com um fator de correção. Este fator de correção foi obtido por intermédio de comparação de soluções numéricas para as duas expressões para uma mistura de vapor de água e ar seco. A tabela A.1 a seguir apresenta os valores para  $\sigma_{12}^{(v)}$  e  $\sigma_{12,KK}^{(v)}$  obtidas pelas simulações numéricas. Desta forma, aproxima-se:

$$K_D \approx 0.75 \sigma_{12, KK}^{(v)} \quad (A.40)$$

Como notado em Loyalka [129],  $\sigma_{12}^{(v)}$  é apenas levemente dependente da temperatura. Na região de transição, utiliza-se uma interpolação entre as expressões (A.27) e (A.40). Considerando o limite de moléculas livres para partículas menores que 0.1  $\mu\text{m}$ , e o limite de deslizamento para partículas maiores que 1.0  $\mu\text{m}$ , a transição localiza-se entre estes dois extremos.

Tabela A.1 - Expressão Difusioforética, T=373K

$\gamma_1$	$\sigma_{12, KK}^{(v)}$	$\sigma_{12}^{(v)}$	$0.75 \sigma_{12, KK}^{(v)}$
0.1	0.1774	0.1421	0.1331
0.2	0.1888	0.1488	0.1416
0.3	0.2013	0.1561	0.1510
0.4	0.2152	0.1641	0.1614
0.5	0.2306	0.1729	0.1730
0.6	0.2478	0.1827	0.1859
0.7	0.2671	0.1937	0.2003
0.8	0.2889	0.2059	0.2117
0.9	0.3135	0.2196	0.2351

#### Apêndice 4 - Transformações de similaridade para o capítulo 5

Neste apêndice serão apresentadas as transformações de similaridade para as equações (5.4)-(5.8), utilizando (5.30)-(5.36) e (5.64). Para iniciar, deve-se reescrever as equações (5.4)-(5.8):

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad , \quad (\text{A.41})$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{(T_\infty - T)}{T_\infty} g + v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad , \quad (\text{A.42})$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{c_{pg} - c_{pv}}{c_p} D_m \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad , \quad (\text{A.43})$$

$$u \frac{\partial W}{\partial x} + v \frac{\partial W}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{av} \frac{\partial W}{\partial y} \right) \quad , \quad (\text{A.44})$$

$$\frac{\partial(u n)}{\partial x} + \frac{\partial(v n)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( D_p \frac{\partial n}{\partial y} \right) + \frac{\partial(v_{th} n)}{\partial y} + \frac{\partial(v_D n)}{\partial y} = 0 \quad , \quad (\text{A.45})$$

Reescrevendo agora as transformações de similaridade, equações (5.30)-(5.36):

$$\Delta T = T_\infty - T_i \quad (\text{A.46})$$

$$a = \left( \frac{g \Delta T}{4\nu^2 T_\infty} \right)^{1/4} \quad (\text{A.47})$$

$$\eta = a x^{-1/4} (y - \delta) \quad (\text{A.48})$$

$$u = \frac{\partial \Psi}{\partial y}; \quad v = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}; \quad (\text{A.49})$$

$$\zeta(\eta) = \frac{\Psi}{4\nu x^{3/4} a} \quad (\text{A.50})$$

$$\theta(\eta) = \frac{T - T_i}{T_m - T_i} \quad (\text{A.51})$$

$$\xi(\tau) = \frac{W - W_i}{W_\infty - W_i} \quad (\text{A.52})$$

e ainda (5.64):

$$c(\eta) = \frac{\pi}{\pi_w} \quad (\text{A.53})$$

Em primeiro lugar deve-se calcular algumas derivadas nas novas variáveis:

$$\frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} [a x^{-1/4} (y - \delta)] = a \left[ -x^{-5/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} - \frac{1}{4} x^{-5/4} (y - \delta) \right] = -\frac{\eta}{4x} - a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} (a x^{-1/4} y) = a x^{-1/4} \frac{\partial}{\partial y} (y) = a x^{-1/4}$$

$$u = \frac{\partial}{\partial y} [4\nu a x^{3/4} \zeta(\eta)] = 4\nu a x^{3/4} \left[ \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right] = 4\nu a x^{3/4} \left[ a x^{-1/4} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u = 4\nu a^2 x^{1/2} \zeta'$$

$$\begin{aligned}
v &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ 4\nu a x^{3/4} \zeta(\eta) \right] = -4\nu a \left[ \frac{3}{4} x^{-1/4} \zeta(\eta) - x^{3/4} \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right] \\
&= -4\nu a \left[ \frac{3}{4} x^{-1/4} \zeta(\eta) + x^{3/4} \left( -\frac{\eta}{4x} - a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right] \Rightarrow \\
\rightarrow v &= -\nu a x^{-1/4} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( 4\nu a^2 x^{1/2} \zeta' \right) = 4\nu a^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( x^{1/2} \zeta' \right) = 4\nu a^2 \left[ \frac{x^{-1/2}}{2} \zeta' - x^{1/2} \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \zeta'}{\partial \eta} \right] \\
&= 4\nu a^2 \left[ \frac{x^{-1/2}}{2} \zeta' + x^{1/2} \left( -\frac{\eta}{4x} - a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) \zeta' \right] \Rightarrow \\
\Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} &= \nu a^2 x^{-1/2} \left[ 2\zeta' - \eta \zeta'' - 4a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left( 4\nu a^2 x^{1/2} \zeta' \right) = 4\nu a^2 x^{1/2} \frac{\partial}{\partial y} \left( \zeta' \right) = \\
&= 4\nu a^2 x^{1/2} \left[ \frac{\partial \eta}{\partial y} \zeta' \right] = 4\nu a^2 x^{1/2} a x^{-1/4} \zeta' \Rightarrow \\
\Rightarrow \frac{\partial u}{\partial y} &= 4\nu a^3 x^{1/4} \zeta''
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial v}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left[ -\nu a x^{-1/4} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) \right] = \\
&= -\nu a x^{-1/4} \left[ \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) \right] = \\
&= \nu a x^{-1/4} \left\{ c x^{-1/4} \left[ (\eta \zeta')' - 3(\zeta)' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} (\zeta)' \right] \right\} \Rightarrow \\
\Rightarrow \frac{\partial v}{\partial y} &= \nu a^2 x^{-1/2} \left[ \eta \zeta'' - 2\zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right]
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial W}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} [(W_\infty - W_i)\xi + W_i] = (W_\infty - W_i) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial \eta} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial W}{\partial x} = - \left( \frac{\eta}{4x} + a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) (W_\infty - W_i) \xi'$$

$$\frac{\partial W}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} [(W_\infty - W_i)\xi + W_i] = (W_\infty - W_i) \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial \eta} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial W}{\partial y} = a x^{-1/4} (W_\infty - W_i) \xi'$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} [(T_\infty - T_i)\theta + T_i] = \Delta T \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = - \left( \frac{\eta}{4x} + a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) \Delta T \theta'$$

$$\frac{\partial T}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} [(T_\infty - T_i)\theta + T_i] = \Delta T \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial T}{\partial y} = c x^{-1/4} (T_\infty - T_i) \theta'$$

$$\frac{\partial n}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} [n_\infty c] = n_\infty \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial x} = - \left( \frac{\eta}{4x} + a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) n_\infty c'$$

$$\frac{\partial n}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} [n_\infty c] = n_\infty \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial \eta} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial y} = a x^{-1/4} n_\infty c'$$

Com todas as transformações aplicadas também às derivadas das diversas variáveis envolvidas, pode-se iniciar a transformação da equação (A.41):

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

que, nas novas variáveis transformadas, passa a:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( 4v a^2 x^{1/2} \zeta' \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[ v a x^{-1/4} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) \right] = 0$$

$$4v a^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( x^{1/2} \zeta' \right) - v a x^{-1/4} \frac{\partial}{\partial y} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) = 0$$

$$4a \left[ \frac{x^{-1/2}}{2} \zeta' + x^{1/2} \frac{\partial \eta}{\partial x} (\zeta') \right] - x^{-1/4} \frac{\partial \eta}{\partial y} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' \right) = 0$$

$$a \left[ 2x^{-1/2} \zeta' + 4x^{1/2} \left( -\frac{1}{4x} - a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) (\zeta') \right] - x^{-1/2} a \left( 2\zeta' - \eta \zeta'' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' \right) = 0$$

$$2\zeta' - \eta \zeta'' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' - \left( 2\zeta' - \eta \zeta'' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' \right) = 0$$

$$2\zeta' - \eta \zeta'' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' - 2\zeta' + \eta \zeta'' + 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta'' = 0$$

$$0 = 0$$

Desta forma, nota-se que a transformação de similaridade escolhida (particularmente a escolha da função de fluxo) automaticamente satisfaz a equação (A.41). Transformando agora a equação (A.44):

$$u \frac{\partial W}{\partial x} + v \frac{\partial W}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{av} \frac{\partial W}{\partial y} \right)$$

obtem-se:

$$\begin{aligned}
& -4va^2x^{1/2}\zeta' \left( \frac{\eta}{4x} + cx^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) \Delta W \xi' - \\
& va x^{-1/4} \left( 3\zeta - \eta\zeta' - 4ax^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) ax^{-1/4} \Delta W \xi' = \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho D_{av} ax^{-1/4} \Delta W \xi' \right) \rightarrow \\
& -va x^{-1/2} \zeta' \left( \eta + 4ax^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} - 3\zeta + \eta + 4ax^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) \xi' = x^{-1/2} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \rho D_{av} \xi' \right) \\
& \rightarrow -va^2x^{-1/2} (3\zeta) \xi' = ax^{-1/4} ax^{-1/4} (\rho D_{av} \xi') \\
& \rightarrow -3\zeta \xi' = \left( \frac{D_{av}}{v} \xi' \right)'
\end{aligned}$$

e finalmente:

$$3Sc \zeta \xi' + \xi'' = 0 \quad (A.54)$$

onde  $Sc = \frac{v}{D_{av}}$ .

Com relação à equação (A.43),

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{T_\infty - T}{T_\infty} g + v \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

obtem-se:

$$\begin{aligned}
& 4va^2x^{1/2}\zeta' \frac{\partial}{\partial x} \left[ 4va^2x^{1/2}\zeta' \right] - \\
& va x^{-1/4} \left( 3\zeta - \eta\zeta' - 4ax^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) \frac{\partial}{\partial y} \left[ 4va^2x^{1/2}\zeta' \right] = \\
& = \frac{\Delta T(1-\theta)}{T_\infty} g + v \frac{\partial}{\partial y} \left[ 4va^3x^{1/4}\zeta'' \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 16v^2 a^4 x^{1/2} \zeta' \left[ \frac{1}{2} x^{-1/2} \zeta' + x^{1/2} \frac{\partial \eta}{\partial x} \zeta'' \right] \\
& 4v^2 a^3 x^{1/4} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \zeta'' = \\
& - \frac{\Delta T (1 - \theta)}{T_x} g + 4v^2 a^3 x^{1/4} \frac{\partial \eta}{\partial y} \zeta''' \\
& 4v^2 a^4 \left[ 2\zeta'^2 - x \left( \frac{\eta}{x} + 4a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) \zeta' \zeta'' - 3\zeta \zeta'' + \eta \zeta' \zeta'' + 4x^{3/4} a \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \zeta'' \right] = \\
& = \frac{\Delta T (1 - \theta)}{T_x} g + 4v^2 a^4 \zeta'''
\end{aligned}$$

$$4v^2 \frac{g \Delta T}{4v^2 T_x} \left[ 2\zeta'^2 - 3\zeta \zeta'' \right] = - \frac{\Delta T (1 - \theta)}{T_x} g + 4v^2 \frac{g \Delta T}{4v^2 T_x} \zeta'''$$

$$\zeta''' + 3\zeta \zeta'' - 2(\zeta')^2 - \theta + 1 = 0 \quad (\text{A.55})$$

Para a equação (A.45),

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{c_{pe} - c_{pv}}{c_p} D_{AB} \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right)$$

obtem-se:

$$\begin{aligned}
& -4v a^2 x^{1/2} \zeta' \left( \frac{\eta}{4x} + a x^{-1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \right) (T_x - T_i) \theta' = \\
& v a x^{1/4} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) a x^{-1/4} (T_x - T_i) \theta' + \\
& \frac{c_{pe} - c_{pv}}{c_p} D_{AB} a x^{-1/4} (W_x - W_i) \xi' a x^{-1/4} (T_x - T_i) \theta' = \\
& - \frac{1}{\rho c_p} \frac{\partial}{\partial y} \left[ k a x^{-1/4} (T_x - T_i) \theta' \right].
\end{aligned}$$

$$v a^2 x^{-1/2} \left( -\eta \zeta' - 4a x^{1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' - 3\zeta + \eta \zeta' + 4a x^{1/4} \frac{\partial \delta}{\partial x} \zeta' \right) \theta' - \phi_{cvg} D_{AB} a^2 x^{-1/2} \Delta W \xi' \theta' = \frac{k}{\rho c_p} a^2 x^{-1/2} \theta''$$

$$(-3\zeta)\theta' - \phi_{cvg} \frac{D_{AB}}{v} \Delta W \xi' \theta' = \frac{\alpha}{v} \theta''$$

$$-3Pr \left( \zeta + \frac{\phi_{cvg}}{3Sc} \Delta W \xi' \right) \theta' = \theta''$$

onde:

$$\phi_{cvg} = \frac{c_{pv} - c_{pg}}{c_p}, \quad \alpha = \frac{k}{\rho c_p}, \quad \Delta W = (W_\infty - W_i)$$

Realizando a transformação de similaridade para a equação de transporte de partículas, equação (A.45):

$$\frac{\partial(u n)}{\partial x} + \frac{\partial(v n)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( D_p \frac{\partial n}{\partial y} \right) + \frac{\partial(v_{th} n)}{\partial y} + \frac{\partial(v_D n)}{\partial y} = 0$$

que passa a:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( 4 v a x^{1/2} \zeta' n_x c \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left[ v a x^{-1/4} (3\zeta - \eta \zeta') n_x c \right]$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( D_p \frac{\partial n_x c}{\partial y} \right) + \frac{\partial(v_{th} n_x c)}{\partial y} + \frac{\partial(v_D n_x c)}{\partial y} = 0$$

$$4 v a^2 \left[ \frac{x^{-1/2}}{2} \zeta' c + x^{1/2} \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} (\zeta' c) \right] - v a x^{-1/4} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} [(3\zeta - \eta \zeta') c]$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( D_p \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial \eta} \right) + v_{th} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial \eta} + c \frac{\partial v_{th}}{\partial y} + v_D \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial \eta} + c \frac{\partial v_D}{\partial y} = 0$$

$$4va^2 \left[ \frac{x^{-3/2}}{2} \zeta' c - x^{1/2} \frac{\eta}{4x} (\zeta' c) \right] - va x^{-1/4} a x^{-1/4} \frac{\partial}{\partial \eta} [(3\zeta - \eta\zeta')c] \\
a x^{-1/4} \frac{\partial}{\partial y} (D_p \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial \eta}) + a x^{-1/4} v_{th} \frac{\partial c}{\partial \eta} + c \frac{\partial v_{th}}{\partial y} + \\
a x^{-1/4} v_D \frac{\partial c}{\partial \eta} + c \frac{\partial v_D}{\partial y} = 0$$

$$va^2 x^{-3/2} [2\zeta' c - \eta(\zeta' c)'] - va^2 x^{-1/2} [(3\zeta - \eta\zeta')c]' - \\
a^2 x^{-1/2} (D_p c)'' + a x^{-1/4} (v_{th} + v_D) c' + c \frac{\partial}{\partial y} (v_{th} + v_D) = 0$$

$$2\zeta' c - \eta(\zeta' c)' - 3(\zeta c)' + (\eta\zeta' c)' - \\
\frac{D_p}{v} c'' + \frac{(v_{th} + v_D)c'}{va x^{-1/4}} + \frac{c}{va x^{-1/2}} \frac{\partial}{\partial y} (v_{th} + v_D) = 0$$

$$2\zeta' c - \eta\zeta' c' - \eta\zeta'' c - 3\zeta c' - 3\zeta' c - \frac{D_p}{v} c'' + \zeta' c + \\
\eta\zeta'' c - \eta\zeta' c' - \frac{(v_{th} + v_D)c'}{va x^{-1/4}} - \frac{c}{va^2 x^{-1/2}} \frac{\partial}{\partial y} (v_{th} + v_D) = 0$$

$$c'' + Sc_p \left[ 3\zeta - \frac{(v_{th} + v_D)}{va x^{-1/4}} \right] c' - \frac{Sc_p}{va^2 x^{-1/2}} \frac{\partial}{\partial y} (v_{th} + v_D) c = 0$$

onde

$$Sc_p = \frac{v}{D_p}$$

$$v_{th} = \left( -vK \frac{\nabla T}{T} \right) \cdot \bar{n} = -\frac{vK}{T} \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{vK}{T_i + \Delta T \theta} \Delta T \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial \eta} =$$

$$\frac{\Delta T v K}{T_i + \Delta T \theta} a x^{-1/4} \theta'$$

$$\frac{\partial v_{th}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\Delta T v K}{T_i + \Delta T \theta} a x^{-1/4} \theta' \right) = \Delta T v K a x^{-1/4} \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\theta'}{T_i + \Delta T \theta} \right) =$$

$$= \Delta T v K a x^{-1/4} \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\theta'}{T_i + \Delta T \theta} \right) =$$

$$= \Delta T v K a^2 x^{-1/2} \left[ \frac{\theta''}{T_i + \Delta T \theta} - \frac{\Delta T (\theta')^2}{(T_i + \Delta T \theta)^2} \right]$$

e

$$v_D = \left\{ -K_D D_{av} \nabla W \right\} \cdot \bar{n} = -D_{av} K_D \frac{\partial W}{\partial y} = -D_{av} K_D \Delta W \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial \eta}$$

$$= -D_{av} K_D \Delta W a x^{-1/4} \xi'$$

$$\frac{\partial v_D}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left( -D_{av} K_D \Delta W a x^{-1/4} \xi' \right) = -D_{av} K_D \Delta W a x^{-1/4} \frac{\partial (\xi')}{\partial y} =$$

$$= -D_{av} K_D \Delta W a^2 x^{-1/2} \xi''$$

Desta forma, pode-se reescrever a equação de continuidade das partículas como:

$$c'' + Sc_p \left[ 3\xi + \frac{\Delta T K}{T_i + \Delta T \theta} \theta' + \frac{K_D \Delta W \xi'}{Sc} \right] c' +$$

$$\left[ \frac{Sc_p \Delta T K}{T_i + \Delta T \theta} \theta'' - \frac{\Delta T (\theta')^2}{T_i + \Delta T \theta} \right] - \frac{Sc_p}{Sc} K_D \Delta W \left[ \xi'' - \Delta W (\xi')^2 \right] c = 0 \quad (A.56)$$

Deve-se agora recalculer as condições de contorno nas novas coordenadas. Para tanto, reescrevem-se as condições de contorno originais, equações (5.11)-(5.19):

- para o meio longe da parede,  $y \rightarrow \infty$ :

$$u = v = 0 \quad , \quad (A.57)$$

$$T = T_\infty \quad , \quad (A.58)$$

$$W = W_\infty = \frac{\rho_{v,\infty}}{\rho} - \frac{\rho_{v,\infty}}{\rho_{v,\infty} + \rho_{a,\infty}} = \frac{M_v P_{v,\infty}}{M_v P_{v,\infty} + M_a P_{a,\infty}} \quad , \quad (A.59)$$

$$n = n_\infty \quad ; \quad (A.60)$$

- para a interface,  $y \rightarrow \delta(x)$ :

$$u_L = u \quad , \quad (A.61)$$

$$\mu_L \frac{\partial u_L}{\partial y} = 0 \quad , \quad (A.62)$$

$$T_L(x, \delta(x)) = T_i(x, \delta(x)) \quad , \quad (A.63)$$

$$W = W_i = \frac{\rho_{v,i}}{\rho} = \frac{\rho_{v,i}}{\rho_{v,i} + \rho_{a,i}} = \frac{M_v P_{v,i}}{M_v P_{v,i} + M_a P_{a,i}} \quad , \quad (A.64)$$

$$n = n_i = 0 \quad . \quad (A.65)$$

Das equações (A.59) e (A.64), utilizando simplesmente a definição (A.52),

$$\xi(\eta \rightarrow 0) = 0 \quad ; \quad \xi(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad . \quad (A.66)$$

Das equações (A.58) e (A.63), utilizando simplesmente a definição (A.51),

$$\theta(\eta \rightarrow 0) = 0 \quad ; \quad \theta(\eta \rightarrow \infty) = 1 \quad . \quad (\text{A.67})$$

Já para as equações de velocidade, o desenvolvimento deve ser mais cuidadoso. Da equação (A.57), para a velocidade  $u$ , te-se:

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial y} \right|_{y \rightarrow \infty} = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial}{\partial y} \left( 4\nu a x^{1/4} \zeta(\eta) \right) \right|_{y \rightarrow \infty} = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial}{\partial y} (\zeta(\eta)) \right|_{y \rightarrow \infty} = 0 \Rightarrow$$

$$\left. \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right|_{y, \eta \rightarrow \infty} = 0 \Rightarrow a x^{-1/4} \zeta'(\infty) = 0 \Rightarrow$$

$$\zeta'(\eta \rightarrow \infty) = 0 \quad . \quad (\text{A.68})$$

A equação (A.61) indica que a velocidade do líquido na interface e a velocidade da mistura gasosa nesta mesma interface devem ser as mesmas. Assim, utilizando (5.20) na interface, chega-se a:

$$u(x, y) \Big|_{\text{interface}} = u_L(x, y) \Big|_{\text{interface}} = \frac{g}{2\nu_L} \delta(x)^2 \quad , \quad (\text{A.69})$$

com a espessura da camada limite dada por

$$\delta(x) = \left( \frac{4\nu_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} x \right)^{1/2} \quad . \quad (\text{A.70})$$

Transformando esta equação por (A.49) e (A.50), obtém-se que:

$$4\nu x^{1/2} a^2 \zeta'(\eta \rightarrow 0) = \frac{g}{2\nu_L} \left( \frac{4\nu_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} x \right)^{1/2} \Rightarrow$$

$$\zeta'(\eta \rightarrow 0) = \frac{1}{4v a^2} \left( \frac{g k_L \Delta T_L}{v_L h_{fg} \rho_L} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow$$

$$\zeta'(\eta \rightarrow 0) = \frac{1}{4v} \left( \frac{g k_L \Delta T_L}{v_L h_{fg} \rho_L} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{4v^2 T_\infty}{g \Delta T} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow$$

$$\zeta'(\eta \rightarrow 0) = \frac{1}{2} \left( \frac{k_L \Delta T_L}{v_L \lambda \rho_L} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{T_\infty}{\Delta T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (A.71)$$

A última condição de contorno relacionada com a velocidade do gás é decorrente da conservação do gás não condensável. Considerando o fluxo de massa do gás não condensável nulo na interface, a seguinte igualdade deve ser satisfeita:

$$\left( \dot{m}_a dx \right)_{\text{interface}} = \rho_i \left[ u_a d\delta - v_a dx \right] b = 0 \quad (A.72)$$

Por outro lado, a velocidade do gás não condensável é nula em qualquer direção:

$$v_a = v + \frac{D}{1 - W_i} \frac{\partial W}{\partial y} = 0 \quad (A.73)$$

Transformando esta equação por (A.37) e (A.38):

$$v a x^{-1/4} \left( 3\zeta - \eta \zeta' - 4a x^{3/4} \frac{d\delta}{dx} \zeta' \right) = \frac{D_{av} a x^{-1/4}}{1 - W_i} \Delta W \xi' \quad (A.74)$$

que na interface ( $\eta \rightarrow 0$ ), leva a:

$$v a x^{-1/4} \left[ 3\zeta - 4a x^{3/4} \left( \frac{1}{4} x^{-3/4} \right) \left( \frac{4v_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} \right)^{\frac{1}{2}} \zeta' \right] = \frac{v a x^{-1/4}}{Sc(1 - W_i)} \Delta W \xi' \quad (A.75)$$

Substituindo a equação (A.71) para  $\zeta'(0)$ , obtém-se finalmente:

$$\zeta(0) = \frac{\Delta W}{3 \text{Sc} (1 - W_i)} \xi' + \frac{1}{2} \left( \frac{4 v_L k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L g} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{g \Delta T}{4 v^2 T_\infty} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{k_L \Delta T_L}{v_L \lambda \rho_L} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{T_\infty}{\Delta T} \right)^{\frac{1}{2}},$$

que implica em:

$$\zeta(0) = \frac{\Delta W}{3 \text{Sc} (1 - W_i)} \xi' + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{v_L} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{k_L \Delta T_L}{h_{fg} \rho_L} \right)^{\frac{1}{4}} \left( \frac{T_\infty}{v^2 \Delta T} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (\text{A.76})$$

Nota-se que apenas o primeiro termo da equação acima é considerado por Hales et al. [125] e também por Minkowycz e Sparrow [119] e Sparrow e Eckert [115]. Sparrow e Eckert [115] são os únicos a discutir brevemente esta simplificação, justificando-a por considerações de camada limite. Neste trabalho foi realizada uma comparação entre os dois termos da expressão acima e verificou-se que o segundo pode ser desprezado. Considerando os dados do problema discutido no capítulo 5, vê-se que o primeiro termo é cerca de 3 ordens de grandeza superior ao segundo termo, como pode ser constatado na Tabela A.2 a seguir. Assim sendo, este segundo termo foi desconsiderado no cálculo da condição de contorno de  $\zeta(0)$ , com esta expressão se resumindo a:

$$\zeta(0) = \frac{\Delta W}{3 \text{Sc} (1 - W_i)} \xi'(0) \quad (\text{A.77})$$

Assim, encerram-se as transformações nas condições de contorno para o capítulo 5.

Tabela A.2 Comparação de Ordens de Grandeza em  
Condição de Contorno para  $\zeta(0)$

$\Delta T$ (K)	Primeiro Termo	Segundo Termo
0.556	$2.43 \cdot 10^{-2}$	$9.03 \cdot 10^{-6}$
2.222	$9.25 \cdot 10^{-2}$	$1.80 \cdot 10^{-5}$
8.889	$3.10 \cdot 10^{-1}$	$3.61 \cdot 10^{-5}$

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Williams, M.M.R. e Loyalka, S.K., *Aerosol Science - theory and practice*, Pergamon Press, Oxford, (1991).
- [2] Stokes, G.G., *On the theories of the internal friction of fluids in motion and of the equilibrium and motion of elastic solids*, Proc. Camb. Philos. Soc., **1**, 16, 1845). Citado na referência [1].
- [3] Stokes, G.G., *On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums*, Camb. Philos. Soc. Trans., **1**, 8, (1851). Citado na referência [1].
- [4] Cunningham, E., *On the velocity of steady fall of spherical particles through fluid medium*, Proc. Royal Soc., **A83**:357, (1910). Citado na referência [1].
- [5] Millikan, R.A., *The general law of fall of a small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature of molecular reflection from surfaces*, Phys.Rev., **22**:1, (1923). Citado na referência [1].
- [6] Smoluchowski, M., *Drei vortrage uber diffusion, Brownsche molekularebewegung und koagulation von kolloidteilchen*, Phys.Z., v. 17, N. 557, (1916). Citado na referência [1].
- [7] Smoluchowski, M., *Versuch einer mathematischen theorie der koagulationskinetic kolloider losungen*, Z. f. Phys. Chemie, **92**:129, (1917). Citado na referência [1].
- [8] Einstein, A., *Investigation on the theory of the brownian motion*, Dover, New York, (1956). Citado na referência [1].

- [9] Chandrasekhar,S., *Stochastic problems in physics and astronomy*, Rev. Mod. Phys., **15**:1.  
Citado na referência [1].
- [10] Wark,K. e Warner,C.F, *Air Pollution: its origin and control*, Harper Collins Publishers,  
New York, (1981).
- [11] Stern,A.C., *Air Pollution, Vol.I*, Academic Press, New York, (1968). Citado na referência  
[10].
- [12] Fuchs,N.A., *The Mechanics of Aerosols*, Pergamon Press, New York, (1964).
- [13] Davies,C.N., *Aerosol Science*, Academic Press, London, (1966).
- [14] Friedlander,S.K., *Smoke, Dust and Haze*, Wiley & Sons (1977).
- [15] Loyalka,S.K., *Mechanics of aerosols in nuclear safety: a review*, Prog. in Nucl. Energy,  
**12**, 1, (1983).
- [16] Vincent,J.H., *Aerosol sampling: Science and Practice*, John Wiley & Sons, (1989).
- [17] Hobbs,P.V., *Aerosol-Cloud-Climate Interactions*, Academic Press, New York, (1993).
- [18] Denis,R., *Handbook on Aerosols*, US DOE, (1976). Citado na referência [1].
- [19] U.S. Nuclear Regulatory Commission, *Reactor Safety Study: an assessment of accident  
risks in U.S. power plants*, WASH-1400, NUREG-75/014, (1975).
- [20] U.S. Nuclear Regulatory Commission, *Severe Accident Risks: an assessment for five U.S.  
Nuclear Power Plants*, NUREG-1150, (1990).

- [21] *The role of Probabilistic Safety Assessment and Probabilistic Safety Criteria in Nuclear Power Plants Safety*, Safety Series 106, Vienna, (1992).
- [22] Gieseke,J.A., Cybulskis,P., Denning,R.S., Kuhlman,M.R., Lee, K.W., Chen,H.,  
*Radionuclide release under specific LWR accident conditions*, BMI-2104, (1984).
- [23] Allison,C., Rest,J., Lorenz,R., Hagrman,D., Carlson,E., Broughton,J., *Severe Core Damage and Associate in-vessel Fission Product release*, Progress in Nuclear Energy, v.20, (1987).
- [24] CONTAIN 1.2 Code Manual, A Computer Code for Severe Accident Analysis, Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico. Prepared for the U. S. Nuclear Regulatory Commission (April, 1993).
- [25] Bunz,H., Koyro,M., Schöck,W., *NAUA Mod 4 - A code for calculating aerosol behavior in LWR core melt accidents - code description and users manual*, KfK 3554, (1983).
- [26] Wooton,R.O., Cybulskis,P., Quayle,S.F., *MARCH2 code description and user's manual*, NUREG/CR-3988, (1984).
- [27] Jordan,H., Kuhlman,M.R., *TRAP-MELT2 user's manual*, BMI-2123, NUREG/CR-4205, (1985).
- [28] Powers,D.A., Brockman,J.E., Shiver,A.W., *VANESA: a mechanistic model of radionuclide release and aerosol generation during core debris interactions with concrete*, NUREG/CR-4308, (1985).
- [29] Gieseke,J.A., Cybulskis,P., Jordan,H., Lee,K.W., Schumacher,P.M., Curtis,L.A.,  
Wooton,R.O., Quayle,S.F., Kogan,V., *Source Term Code Package - A user's guide (Mod.1)*, NUREG/CR-4587, (1986).

- [30] Summers,R.M., Cole Jr.,R.K., Boucheron,E.A., Carmel,M.K., Dingman,S.E., Kelly,J.E., *MELCOR 1.8.0: A computer code for severe nuclear reactor accident source term and risk assessment analysis*, SANDIA National Laboratories report SAND-90-0364 (NUREG/CR-5531) (1991).
- [31] Cybulskis,P., *Assessment of the XSOR codes*, NUREG/CR5346, (1989).
- [32] Plys,M.G., Paik,C.Y., Henry,R.E., Wu,C., Suh.K.Y., Lee,S.J., McCartney,M.A., Wang,Z., *MAAP4 model and validation status*, ASME/JSME Nuclear Engineering Conference, San Francisco, (1993).
- [33] Renault,C., Mailliat,A., *ESCADRE mod0 general presentation and assessment overview*, NT-93/46, IPSN, (1993).
- [34] International Atomic Energy Agency, *Probabilistic Safety Assessment - INSAG-6*, Safety Series 75- INSAG-6, (1992).
- [35] Brockmann,J.E., *Ex-vessel releases: aerosol source terms in reactor accidents*, Progress in Nuclear Energy, v.19, No.1, (1987).
- [36] Lipinski,R.J., Mast,P.K., Powers,D.A., Walker,J.V., *Uncertainty in radionuclide release under specific LWR conditions*, v.1, SAND84-0410, (1985). Citado na referência [35].
- [37] Leigh,C.D. e Helton,J.C., *A sensitivity study of aerosol agglomeration and deposition using the MAEROS model*, SAND83-2677, (1984). Citado na referência [35].
- [38] Helton,J.C., Iman,R.L., Johnson,J.D., Leigh,C.D., *Uncertainty and sensitivity analysis of a model for multicomponent aerosol dynamics*, SAND84-1307J, (1984). Citado na referência [35].

- [39] Zammite,R., *Impact de l'accident de TMI sur les programmes de recherche et developpement*, CEA-DAS-651, (1989).
- [40] Rahn,F.J., Collén,J., Wright,A.L., *Aerosol behavior experiments on light water reactor primary systems*, Nuclear Technology, 81, (1988).
- [41] Kuczera,B., Albrecht,H., Bunz,H., Schöck,W., *Fission- product aerossols in the reactor containment under severe accident conditions*, Kerntechnik, 53, (1988).
- [42] Zammite,R., *The state of and perspective for pressurized water reactor safety research in France*. The eigh Technical Committee Meeting on Nuclear Thermal Reactor Safety Research, Viena, Novembro, (1989).
- [43] Vernier,P.J., Solignac,P., *A test of some condensation models in the presence of a noncondensable gas against the ECOTRA experiment*, Nuclear Technology, 77, (1987).
- [44] Beard,A.M., Benson,C.G., Bowsher,B.R., Dickinson,S., Nichols,A.L., Beattie,I.R., Jones,P.J., Ogden,J.S., Young,N.A., Buckle,E.R., *Fission Product and aerossol behavior within the containment*, EUR-12844, (1990).
- [45] Kress,T.S., Beahm,E.C., Weber,C.F., Parker,G.W., *Fission product transport behaviour*, Nuclear Technology, 101, (1993).
- [46] Fontana,M.H., *Recent advances in severe accident technology - Direct Containment Heating in advanced light water reactors*, Nuclear Technology, 101, (1993).
- [47] Report to the American Nuclear Society of the Study Group on Radionuclide Release from Severe Accidents in Nuclear Power Plants, Rev. Mod. Phys., 57, Part II, S1, (1985).

- [48] Heames,T.J., Williams,D.A., *VICTORIA: a mechanistic model of radionuclide behavior in the reactor coolant system under severe accident conditions*, NUREG/CR-5545, (1990).
- [49] Bunz,H., *PardisekoIV- Ein computerprogramm zur berechnung des aerosolverhaltens in geschlossenen behältern*, KfK-3545, (1983). Citado em [52].
- [50] Ramsdale,S.A., *AEROSIM user manual*, UKAEA, Safety & Reliability Directorate (1986).
- [51] Soda,K., Yamano,N., Naritomi,M., Hashimoto,K., *A Computer code for removal of volatile fission products and aerosol in LWR containment: REMOVAL/mod0 - code description and user's manual*, indicada como "a ser publicada" na referência [53].
- [52] Beonio-Brocchieri,F., Bunz,H., Schöck,W., Dunbar,I.H., Gauvain,J., Miyahara,S., Soda,K., Himeno,Y., Yamano,N., *Nuclear Aerosol Codes*, Nuclear Technology, 81 (1988).
- [53] Dunbar,I.H., Fermandjian,J., Gauvain,J., *The intercomparison of aerosol codes*, Nuclear Technology, v.82 (1988).
- [54] Bunz,H., Dunbar,I.H., Gauvain,J., Ricchena,R., *Comparison of computer codes relative to the aerosol behavior in the reactor containment building during severe core damage accidents in a PWR*, International ANS/ENS Topical Meeting on Thermal Reactor Safety, San Diego (1986).
- [55] Gelbard,F., *MAEROS Users Manual*, NUREG/CR-1391, SAND80-0822, Sandia National Laboratories, (1982).
- [56] Loyalka,S., *Containment analysis for nuclear source terms*, Progress in Nuclear Energy, v.19, No.1, (1987).

- [57] Bunz,H., Koyro,M., Propheter,B., Schöck,W., Wagner-Ambts,M., Aerosol behavior under core meltdown accident conditions, KfK 4450, (1988).
- [58] Epstein,M., Ellison,P.G., *Correlations of the rate of removal of coagulating and depositing aerosols for application to nuclear reactor safety problems*, Nuclear Engineering and Design, 107, (1988).
- [59] Corradini,M.L., *Severe accidents and severe accident codes*, Short course: Multiphase flow and heat transfer, Zurich (1992).
- [60] Washington,K.E., *Overview of the CONTAIN severe accident containment analysis code*, SAND91-0709C (1991).
- [61] Smith,K., Talens,H., Baratta,A., *Containment response to a main steam-line break using CONTAIN, RIS, and TRAC/BF1*, Transactions of the American Nuclear Society, 63 (1991).
- [62] Hyman.C.R., *CONTAIN calculations of debris conditions adjacent to the BWR MARK I drywell sell during the later phases of a severe accident*, Nuclear Engineering and Design, 121 (1990).
- [63] Abbey,F., Shikarski,W.O., *Aerosol behavior and light water reactor source terms*, Nuclear Technology, 81 (1988).
- [64] Henneges,G., Scholtyssek,W., *CONTAIN code applications for an improved containment concept of future light water reactors*,
- [65] Gido,R.G., Williams,D.C., Gregory,J.J., *PWR dry containment parametric studies*, NUREG/CR-5630 (1991).

- [66] Rij,H.M., von Vonka,V., *Feasibility study of COCOS, condensation of containment atmosphere on structures*, ECN-I-90-016 (1989).
- [67] Russel,N.A., Williams,D.C., *Comparison of CONTAIN code simulations to experimental ice condenser test data*, SAND-89-3096C (1990).
- [68] Soda,K., Sugimoto,J., Yamano,N., Shiba,K., *Recent development and results from severe accident research in Japan*, NUREG/CP-0118, pg. 12-7 (1991).
- [69] Fynbo,P., Haeggbloom,H., Jokiniemi,J., *Aerosol transport in severe reactor accidents*, NORD-1990-45 (1990).
- [70] Gelbard,F., Tills,J.L., Murata,K.K., *CONTAIN code calculations for the LA-4 experiment*, SAND-89-3010C (1990).
- [71] Park,C.K., Tutu,N.K., Grimshaw,C.A., Ginsberg,T., *A sensitivity analysis of direct containment heating*, Transactions of the American Nuclear Society, 61 (1990).
- [72] Valdez,G.D., Williams,D.C., *CONTAIN code calculations of the effects on the source term of cesium iodide to elemental iodine conversion due to severe hydrogen burns*, CONF-860938 (1986).
- [73] Boyack,B.E., Corradini,M.L., Denning,R.S., Khatib-Rahbar,M., Loyalka,S.K. e Smith,P.N., *CONTAIN Independent Peer Review*, LA-12866 (1995).
- [74] Muller,H., *Zur theorie der elektrischen ladung und der koagulation der kolloide*, Kolloidchem. Beith, **26**:257, (1928). Citado na referência [1].

- [75] Müller,H., *Zur allgemeinen theorie der raschen koagulation*, Kolloidchem. Beith, **27**:223, (1928). Citado na referência [1].
- [76] Zebel,G., *Zur theorie des koagulation elektrisch ungeladener aerosole*, Kolloid Z., **156**:102, (1958). Citado na referência [1].
- [77] Zebel,G., *Coagulation of aerosols*, in *Aerosol Science*, editado por Davies,C.N., Academic Press, London, (1966).
- [78] Fuchs,N.A. e Sutugin,A.G., *High dispersed aerosols*, Topics in current aerosol research, vol.2, p.1, editado por: Hidy,G.M. e Brock,J.R., Pergamon Press, Reino Unido, (1971).
- [79] Buckley,R.L. e Loyalka,S.K., *Implementation of a new model for gravitational collision cross sections in nuclear aerosol codes*, *Nucl. Technol.*, **109**, 346-56 (1995).
- [80] Saffman,P.G. e Turner,J.S., *On the collision of drops in turbulent clouds*, *Journal of Fluid Mechanics*, **1**, 16 (1956).
- [81] Scott,W.T., *Analytic studies of cloud droplet coalescence I*, *J.Atmos.Sci.*, v.25, N.54, (1968). Citado na referência [84].
- [82] Brock,J.R., *Condensational growth of atmospheric aerosols*, *J.Coll.Interfac.Sci.*, v.39, N.1, (1972). Citado na referência [84].
- [83] Ramabhadran,T.E., Peterson,T.W., Seinfeld,J.H., *Dynamics of aerosol coagulation and condensation*, *AIChE Journal*, v.22, N.5, (1976).
- [84] Seinfeld,J.H., Kim,Y.P., *Aerosol dynamics*, *Aerosol Science, Industry, Health and Environment*.

- [85] Berry,E.X, *Clouds droplet growth by condensation*, Journal of Atmospheric Science, v.24, N.688, (1967). Citado na referência [1].
- [86] Middleton,P., Brock,J.R., *Simulation of aerosol kinetics*, Journal of Colloid Interface Science, v.54, N.249, (1976).
- [87] Suck,S.H., Brock,J.R., *Evolution of atmospheric aerosol particle size distributions via Brownian coagulation: numerical simulation*, Journal of Aerosol Science, v.10, N.581, (1979). Citado nas referências [1 e 82].
- [88] Emami,A., Loyalka,S.K., *Role of condensation in aerosol source term for liquid-metal fast breeder reator containment*, Ph.D. Thesis, University of Columbia, (1981). Citado na referência [1].
- [89] Tsang,T.H., Brock,J.R., *Aerosol Science Technology*, v.3, (1984). Citado na referência [84].
- [90] Tsang,T.H., Korgaonkar,N., *Aerosol Science Technology*, v.7, (1987).
- [91] Smolarkiewicz,P.K., *A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion*, Monthly Weather Review, v.111, N.479, (1983). Citado na referência [1].
- [92] Tsang,T.H., Rao,A., *Comparison of different numerical schemes for condensational growth of aerosols*, *Aerosol Science Technology*, v.9, (1988). Citado na referência [1].
- [93] Tsang,T.H., Rao,A., *A moving finite element method for the population balance equation*, *Int. J. Numer. Methods Fluids*, v.10, (1990). Citado na referência [1].

- [94] Yanenko,N.N., *The method of fractional steps*, Springer-Verlag, (1971).Citado na referência [84].
- [95] Gelbard,F.M., Seinfeld,J.H., Simulation of multicomponent aerosol dynamics, *J. Colloid Interface Sci.*, v.78, (1980).
- [96] Duderstadt,J.J., Martin,W.R., *Neutron transport theory*, John Wiley and Sons, (1979).
- [97] Basset,M.F., Gelbard,F., Seinfeld,J.H., *Mathematical model for multicomponent aerosol formation and growth in plumes*, *Atmospheric Environment*, v.15, N.10, (1981).
- [98] Pilinis,C., Seinfeld,J.H., Seigneur,C., *Atmospheric Environment*, v.22, (1988). Citado na referência [84].
- [99] Warren,D.R., Seinfeld,J.H., *Aerosol Science Technology*, v.4, (1985). Citado na referência [84].
- [100] Gelbard,F., *Aerosol Science Technology*, (1990). Citado na referência [84].
- [101] Fernandes,A. e Loyalka,S.K., *Modeling of diffusive-gravitational aerosol deposition in CONTAIN*, *Nuclear Technology*, **113:2**, 155-166 (1996).
- [102] Fernandes,A. e Loyalka,S.K., *Modeling of diffusive-gravitational aerosol deposition*, *Transactions of the American Nuclear Society*, **73**, 270-273, (1995).
- [103] Crump,J.G. e Seinfeld,J.H., *Turbulent Deposition and Gravitational Sedimentation of an Aerosol in a Vessel of Arbitrary Shape*, *J. Aeros. Sci.*, **12**, 405-15 (1981).

- [104] Crump,J.G., Flagan,R.C. e Seinfeld, H., *Particle wall loss rates in vessels*, Aerosol Science and Engineering, **2**, 303-309, (1983).
- [105] Okuyama,K., Kousaka,Y., Yamamoto,S. e Hosokawa,T., *Particle loss of aerosols with diameters between 6 and 2000 nm in stirred tank*, Journal of Colloid and Interface Science, **110:1**, 214-223, (1986).
- [106] Abramovitz,M. e Stegun,I.A., editores, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover (1973).
- [107] Fernandes,A. e Loyalka,S.K., *Modeling of thermophoretic deposition of aerosols in nuclear reactor containments*, Nuclear Technology, (1996).
- [108] Loyalka,S.K., Tompson,R.V. e Sher,R., *Thermophoretic aerosol deposition: some modeling considerations*, Transactions of the American Nuclear Society, **64**, 737 (1991).
- [109] Schlichting,H., *Boundary Layer Theory*, McGraw-Hill, New York (1960).
- [110] Nazaroff,W.W. e Cass,G.R., *Particle deposition from a natural convection flow onto a vertical isothermal flat plate*, Journal of Aerosol Science, **18:4**, 445 (1987)
- [111] Sparrow,E.M., Tsou,F.K. e Kurtz Jr.,E.J., *Stability of Laminar Free-Convection Flow on a Vertical Plate*, The Physics of Fluids, **8**, 1559 (1965).
- [112] Ede,A.J., *Advances in Free Convection*, Advances in Heat Transfer, Vol. 4, Edited by J.P.HARTNETT and T.F.IRVINE,JR., Academic Press (1967).
- [113] Wolfram,S., *Mathematica: a system for doing mathematics by computer*, Addison Wesley (1993).

- [114] Batchelor, G.K. e Shen, C., *Thermophoretic deposition of particles in gas flowing over cold surfaces*, Journal of Colloid and Interface Science, **107:1**, 21 (1985).
- [115] Sparrow, E.M. e Eckert, E.R.G., *Effects of superheated vapor and noncondensable gases on laminar film condensation*, A.I.Ch.E. Journal **7(3)**, 473-477 (1961).
- [116] Bejan, A., *Convection Heat Transfer*, John Wiley & Sons, New York (1995).
- [117] Nusselt, W., *Z. Ver. deut. Ing.*, **60**, 541 e 569 (1916).
- [118] Jakob, M., *Heat Transfer, Volume I*, John Wiley & Sons, New York (1949).
- [119] Minkowycz, W.J. e Sparrow, E.M., *Condensation heat transfer in the presence of noncondensables, interfacial resistance, superheating, variable properties, and diffusion*, Int. J. Heat Mass Transfer **9**, 1125-1144 (1966).
- [120] Sparrow, E.M., Minkowycz, W.J., Saddy, M., *Forced convection condensation in the presence of noncondensables and interfacial resistance*, Int. J. Heat Mass Transfer, **10**, 1829-1845 (1967).
- [121] Mc Adams, W.H., *Heat Transmission, capitulos 28 e 30*, Mc-Graw Hill, New York (1954).
- [122] Collier, J.G., *Convective Boiling and Condensation*, McGraw Hill, New York (1981).
- [123] Stephan, K., *Heat Transfer in Condensation and Boiling*, Springer-Verlag, New York (1992).
- [124] Fujii, T., *Theory of laminar film condensation*, Springer-Verlag, New York (1991).

- [125] Hales, J.M., Schwendiman, L.C., Horst, T.W., *Aerosol transport in a naturally-convected boundary layer*, Int.J.Heat Mass Transfer **15**, 1837-1850 (1972).
- [126] Waldmann, L. e Schmitt, K.H., *Thermophoresis and diffusiophoresis of aerosols*, in Aerosol Science, editado por Davies, C.N., Academic Press, London, (1966).
- [127] Cipolla JR., J.W., Lang, H., Loyalka, S.K., *Temperature and partial pressure jumps during evaporation and condensation of a multi-component gas mixture*, Anais do '9<sup>th</sup> International symposium on Rarefied Gas Dynamics', editores M.Becker e M.Fiebig (DFVLR Press, Porz-Wahn, 1974), vol.2, pp.F4-1 a F4-10.
- [128] Ivchenko, I.N., Loyalka, S.K., Tompson, R.V., *Boundary jump phenomena in a binary gas mixture*, a ser publicado.
- [129] Loyalka, S.K., *Velocity slip coefficient and the diffusion slip velocity for a multicomponent gas mixture*, Physics of Fluids, **14**:12, 2599-2604, (1971).
- [130] Lang, H., Loyalka, S.K., *Diffusion slip velocity: theory and experiment*, Z. Naturforsch, **27a**, 1307, (1972).
- [131] Chapman, S. e Cowling, T.G., *The mathematical theory of non-uniform gases*, Cambridge University Press, (1970). Citado nas referências [129] e [130].
- [132] Kramers, H.A. e Kistemaker, J., Physika, **10**, 699, (1943). Citado nas referências [129] e [130].