Universidade Federal do Triângulo Mineiro – UFTM Instituto de Ciências Tecnológicas e Exatas – ICTE Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental – PPGCTA

Otávio Augusto Puglieri Cappa

Remoção de ácido húmico em águas usando cavitação hidrodinâmica: uma abordagem experimental e computacional

Uberaba 2018

Otávio Augusto Puglieri Cappa

Remoção de ácido húmico em águas usando cavitação hidrodinâmica: uma abordagem experimental e computacional

Dissertação apresentada à Universidade Federal do Triângulo Mineiro, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental, para obtenção do título de mestre.

Orientador: Julio Cesar de S. Inácio Gonçalves

Uberaba 2018

Catalogação na fonte: Biblioteca da Universidade Federal do Triângulo Mineiro

 Cappa, Otávio Augusto Puglieri Remoção de ácido húmico em águas usando cavitação hidrodinâmica: uma abordagem experimental e computacional / Otávio Augusto Puglieri Cappa. -- 2018. 90f. : il., fig., graf., tab.
 Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Ambiental) --Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Uberaba, MG, 2018 Orientador: Prof. Dr. Julio Cesar de Souza Inácio Gonçalves
 1. Água - Tratamento. 2. Água - Purificação. 3. Ácido húmico. 4. Cavitação. 5. Hidrodinâmica. I. Gonçalves, Julio Cesar de Souza Inácio. II. Universidade Federal do Triângulo Mineiro. III. Título.

OTÁVIO AUGUSTO PUGLIERI CAPPA

Remoção de ácido húmico em águas usando cavitação hidrodinâmica: uma abordagem experimental e computacional

Dissertação apresentada à Universidade Federal do Triângulo Mineiro, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental, para obtenção do título de mestre.

Orientador: Julio Cesar de S. Inácio Gonçalves

31 de agosto de 2018.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Julio Cesar de Souza Inácio Gonçalves Universidade Federal do Triângulo Mineiro

Prof. Dr. Stênio de Sousa Venâncio Universidade Federal do Triângulo Mineiro

Prof. Dr. Carlos Eugênio Pereira Universidade Federal de Uberlândia

Dedico esse trabalho aos meus pais, que em todos momentos foram fonte de força, apoio e inspiração.

Primeiramente agradeço a Deus pela saúde tanto física quanto mental e por ter me dado a oportunidade de concluir mais essa etapa em minha vida.

Agradeço aos meus pais, José Roberto e Sandra, que independentemente da situação sempre estiveram prontos para me apoiar, dar forças e me impulsionar em mais essa caminhada. Foram suas palavras de conforto e suas lutas diárias que sempre me inspiravam e me preparavam para mais essa vitória.

Agradeço também ao meu avô Miguel que em suas últimas lições me mostrou o tanto que devemos dar valor as pequenas coisas e o tanto que a vida deve ser vivida. Me ensinou que enquanto temos saúde e família temos tudo, o restante podemos correr atrás. Dentro de nossas dificuldades, não devemos deixar de agradecer em nenhum momento sermos aptos a enfrentalas.

Agradeço ao meu amigo e orientador, Julio Cesar, pelas inesgotáveis horas de conhecimento e parceria. Digo que pelo seus esforços e boa vontade em me ensinar, saio do mestrado uma pessoa totalmente moldada pelos seus ensinamentos, força de vontade e profissionalismo. Com certeza foi fonte de inspiração nos momentos mais complicados da pesquisa.

Agradeço a Anaiza, por ter me acompanhado por muito tempo nessa caminhada, sempre me apoiando e me motivando a fazer o meu melhor. A sua parceria e cumplicidade fizeram a diferença nas horas mais difíceis.

Agradeço aos meus amigos e parceiros de pesquisa Thiago e ao Matheus pelas incansáveis ajudas e apoios durante minha caminhada. Em vários momentos em que me via sem explicações, ambos colaboraram de forma brilhante para solução dos problemas.

Agradeço todos a todos do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental, em especial ao professor Deusmaque e a secretária Luciana, pela ajuda tanto na pesquisa quanto nos demais problemas acadêmicos.

Agradeço aos meus amigos de Santa Cruz das Palmeiras, em especial Eduardo, Mário e Iraldo, que apesar da distância sempre estiveram presentes e tornando os meus momentos de lazer mais felizes.

Agradeço aos meus amigos de Uberaba, em especial Luiz Neto, Inácio, Mariane, Isabella, Betânia, Vitor, Tamirys, Fernando, Heuler, Marcos e Felipe, que fizeram que os dias fluíssem e que a caminhada fosse menos árdua.

Agradeço, por fim, a UFTM e a FAPEMIG tanto pelo apoio financeiro quanto pela estrutura fornecida para o desenvolvimento da pesquisa.

"Para conquistar os seus sonhos, será necessário lidar com medos e desafios. É muito importante ter esse discernimento. Nossas maiores realizações estão ali no meio, entre os nossos maiores desejos e os nossos maiores temores."

- Caio Carneiro

RESUMO

A cavitação hidrodinâmica surgiu, no início do século XXI, como um método promissor para o tratamento de águas de abastecimento e residuárias. Até o momento, a maioria dos estudos dedicou-se a mostrar o potencial da cavitação hidrodinâmica em remover patógenos e poluentes orgânicos. A cor advinda das soluções de ácido húmico é um caso a ser combatido nas águas de abastecimento, principalmente na região Norte do país. Pesquisas com uso de processos oxidativos avançados, juntamente com a cavitação hidrodinâmica, já têm sido realizadas. Contudo, pesquisas direcionadas à otimização de parâmetros geométricos de câmaras de cavitação hidrodinâmica ainda são necessárias. O objetivo deste estudo foi avaliar a remoção de cor de uma solução de ácido húmico e otimizar placas para sua melhor eficiência. Para tanto, simulações computacionais e procedimentos experimentais foram realizados. Cinco diferentes placas de orifício (três com um único orifício e duas com múltiplos orifícios) foram estudadas. Realizou-se simulações computacionais para identificar parâmetros hidráulicos e compará-los às eficiências de remoção de cor. Nos procedimentos experimentais foram utilizados quatro volumes de peróxido de hidrogênio 30% w/v (0 ml, 1 ml, 5 ml e 10 ml) em uma solução de 9 L de ácido húmico à 100 ppm. O uso do oxidante apresentou o ponto ótimo de remoção de cor com 1ml de peróxido para os 9 L de solução. Os resultados mostraram que existem dois principais grupos de placas: as placas de um orifício geraram menor número de zona de baixa pressão, maior intensidade e reduzida taxa de recuperação de pressão; e, as placas de múltiplos orifícios apresentaram maior número de zonas de baixa pressão, menor intensidade e elevada taxa de recuperação. As primeiras tiveram melhor eficiência de remoção de cor com o uso do agente oxidante (próximas aos 90%). Enquanto o outro grupo apresentou significativa eficiência sem o uso de oxidante (próximas aos 70%).

Palavras-chave: cavitação hidrodinâmica; ácido húmico; simulação; remoção de cor.

ABSTRACT

Hydrodynamic cavitation emerged at the beginning of the 21st century as a promising method for supply water and wastewater treatment. So far, most studies have focused on the potential of hydrodynamic cavitation in removing pathogens and organic pollutants. The color provided by acid humic solutions is a case to be fight, mainly in the north of the country. Searches with the use of advanced oxidative process, herewith hydrodynamic cavitation, have already done. However, searches that aim the optimization of geometric parameters of hydrodynamic cavitation chambers are necessary yet. The objective of this study was assessed the color removal by a humic acid solution and optimize plates for its best efficiency. Therefore, computational simulations and experimental procedures were realized. Five different orifice plates (three with one orifice and two with multiple-orifices) were assessed. It was realized computational simulations to identify hydraulic parameters and compare them with the color remove efficiencies. In the experiment procedures were used four peroxide hydrogen volumes 30% w/v (0 ml, 1 ml, 5 ml and 10 ml) in a solution of 9 L of humic acid at 100 ppm. The oxidant use showed the optimum dye remove point with 1 ml of peroxide for 9 L of solution. The results have showed that exists two mainly plates group: plates with one orifice generates less number of lower pressure zone, high intensity and reduced pressure recovery zone; and, plates with multiple-orifices showed major number of lower pressure zone, low intensity and high-pressure recovery zone. The firsts have better efficiency of color removal with the use of oxidant agent (around 90%). While, the other group have showed significant efficiency without the use of oxidant (around 70%).

Keywords: hydrodynamic cavitation; humic acid; computational simulation; color remove.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| Figura 1 – Esquema da ocorrência do fenômeno cavitacional e do perfil de pressão28 |
|--|
| Figura 2 – Aparato de cavitação hidrodinâmica41 |
| Figura 3 – Geometria da câmara de cavitação plotada no eixo Z43 |
| Figura 4 – Interface do Workbench do ANSYS45 |
| Figura 5 – Setup do Fluent |
| Figura 6 – Opções gerais da simulação47 |
| Figura 7 – Modelos a serem adotados47 |
| Figura 8 – Escolha dos materiais e fluidos de simulação48 |
| Figura 9 – Interação entre as duas fases no modelo bifásico |
| Figura 10 – Condições de contorno |
| Figura 11 – Condições de contorno para pressão de saída50 |
| Figura 12 – Métodos de solução numérica51 |
| Figura 13 – Inicialização da solução numérica52 |
| Figura 14 – Início da simulação53 |
| Figura 15 – Layout das iterações entre os residuais escalares53 |
| Figura 16 – Exemplo de perfil de pressão e os parâmetros hidráulicos observados. Em destaque |
| a zona de baixa pressão |
| Figura 17 – Placas utilizadas nas simulações55 |
| Figura 18 – Aparato de cavitação em funcionamento56 |
| Figura 19 – Placas utilizadas na câmara de cavitação57 |
| Figura 20 – Placa de 3 espessuras com 9 furos rompida58 |
| Figura 21 – Placa de 3 espessuras com 9 furos em alumínio58 |
| Figura 22 – Amostra em repouso nos balões de separação59 |
| Figura 23 - Variação da absorbância do ácido húmico em função do comprimento de onda60 |
| Figura 24 – Amostras das 5 diluições do ácido húmico para criação da curva de calibração60 |
| Figura 25 – Curva de calibração para a solução de ácido húmico à 100ppm de 1:4, para o |
| comprimento de onda de 210 ppm e pH 2,561 |
| Figura 26 – Vazões médias obtidas conforme a variação de densidade elementos63 |
| Figura 27 – Perfil de velocidade e pressão no eixo Z da câmara de cavitação64 |
| Figura 28 – Perfil de pressão no eixo Z da câmara de cavitação para o modelo bifásico66 |
| Figura 29 - Erro relativo dos modelos bifásico e monofásico em relação a vazão e o volume de |
| vapor produzido pelo aumento da pressão de entrada67 |

| Figura 30 – Perfis de pressão das 10 simulações |
|--|
| Figura 31 – Comportamento da pressão dentro dos orifícios da placa de 15mm70 |
| Figura 32 - Perfis de pressão nas placas A, B, C, D e E. As linhas tracejadas em vermelho |
| indicam a distância média de recuperação para os dois diferentes grupos de placas71 |
| Figura 33 – Comportamento da pressão nas placas A, B, C, D e E72 |
| Figura 34 – Amostras com 1ml de peróxido após 24 horas de repouso. À direita amostra com |
| sem tratamento. À esquerda amostra com 3 minutos de tratamento74 |
| Figura 35 – Comportamento do corpo de fundo após as 24 horas de repouso74 |
| Figura 36 – Exemplos de amostras que sofreram efeito de parede75 |
| Figura 37 – Eficiência de remoção de cor para as 5 placas sem o uso de peróxido76 |
| Figura 38 – Eficiência de remoção de cor para as 5 placas com 1 ml de peróxido77 |
| Figura 39– Eficiência de remoção de cor para as 5 placas com 5 ml de peróxido78 |
| Figura 40– Eficiência de remoção de cor para as 5 placas com 10 ml de peróxido79 |
| Figura 41 – Eficiência de remoção de cor com uso da placa A e E para os volumes de 0ml, 1ml, |
| 5ml e 10ml de peróxido |

| 1 I N I | ſRODUÇÃO | 23 |
|---------|---|----|
| 20B | JETIVOS | 25 |
| 2.1 | OBJETIVO GERAL | 25 |
| 2.2 | OBJETIVOS ESPECÍFICOS | 25 |
| 3RE | VISÃO BIBLIOGRÁFICA | 27 |
| 3.1 | CAVITAÇÃO HIDRODINÂMICA | 27 |
| 3.1.1 | O fenômeno cavitacional | 27 |
| 3.1.2 | Fundamentos hidráulicos | 27 |
| 3.1.3 | Processos oxidativos gerados pela cavitação | 29 |
| 3.1.4 | Usos da cavitação hidrodinâmica para desinfecção e degradação | 30 |
| 3.2 | SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL | 34 |
| 3.2.1 | Plataforma ANSYS Inc | 34 |
| 3.2.2 | Equações governamentais | 35 |
| 3.3 | ÁCIDO HÚMICO | 38 |
| 3.3.1 | Contextualização | 38 |
| 3.3.2 | Composição química | 39 |
| 4MA | TERIAIS E MÉTODOS | 41 |
| 4.1 | O APARATO | 41 |
| 4.2 | ETAPA COMPUTACIONAL | 43 |
| 4.2.1 | Teste de independência de malhas (TIM) | 43 |
| 4.2.2 | Validação dos modelos | 45 |
| 4.2.3 | Análise dos perfis de pressão | 54 |
| 4.2.4 | Otimização de placas | 55 |
| 4.3 | ETAPA EXPERIMENTAL | 55 |
| 4.3.1 | Preparação das amostras | 55 |
| 4.3.2 | Tratamento cavitacional das amostras | 56 |
| 4.3.3 | Testes de espectroscopia | 59 |
| 5RE | SULTADOS E DISCUSSÃO | 63 |
| 5.1 | ETAPA COMPUTACIONAL | 63 |

SUMÁRIO

| 5.1.1 | Teste de independência de malhas | 63 |
|----------|--|-----|
| 5.1.2 | Validação dos modelos | 66 |
| 5.1.3 | Análise dos perfis de pressão | 67 |
| 5.1.4 | Otimização das placas | 70 |
| 5.2 | ETAPA EXPERIMENTAL | 73 |
| 5.2.1 | Tratamento cavitacional das amostras | 73 |
| 5.2.2 | Testes de espectroscopia | 75 |
| 5.3 | OTIMIZAÇÃO DAS CÂMARAS DE CAVITAÇÃO A PARTIR | DOS |
| RESULTAI | DOS EXPERIMENTAIS E COMPUTACIONAIS | 80 |
| 6 | CONCLUSÃO | 83 |
| REFERÊN | CIAS | 85 |
| APÊNDICI | E A – INTERFACE DO MESH DESIGNER | 90 |

1 INTRODUÇÃO

Em sistemas hidráulicos, a cavitação hidrodinâmica é um problema a ser combatido (PORTO, 2006). A sua capacidade de deterioração de equipamentos é elevada e, de modo geral, é evitada. Entretanto, se o fenômeno for aplicado à um sistema controlado, ela pode ser um agente degradante, com elevado potencial de oxidação (GAGOL, PRZYJAZNY e BOCZKAJ, 2018; PARSA E ZONOUZIAN, 2013; RAUT-JADHAV et al., 2016).

Devido à capacidade de gerar um ambiente inóspito e de alto grau de mistura, a cavitação surgiu com grande importância para a área ambiental, sendo aplicada na desinfecção de água (ARROJO, BENITO E TARIFA, 2007; MEZULE et al., 2009), síntese de biodiesel (GHAYAL, PANDIT e RATHOD, 2013; CHUAH et al., 2016), tratamento de efluentes (BHANDARI, SOROKHAIBAM e RANADE, 2016; RAUT-JADHAV et al., 2016), remoção de algas (BATISTA et al. 2017), e degradação de compostos emergentes (CAPOCELLI, 2014; HUANG et al., 2013).

Um dos usos da cavitação hidrodinâmica é a remoção de cor em efluentes, geralmente provindos de indústrias têxteis (KUMAR, SONAWANE e PANDIT, 2017; RAJORIYA, BARGOLE e SAHARAN, 2017). Entretanto, devido a sua capacidade de mineralização de matéria orgânica, sua aplicação também se torna viável para corpos hídricos ricos em sólidos suspensos totais. Como é o caso do Rio Negro, na região norte do país. Cidades ribeirinhas, por falta de tratamento eficiente, ou até mesmo a sua ausência, sofrem com a elevada coloração da água de abastecimento. O ácido húmico é responsável por praticamente 50% dos sólidos suspensos totais dessas águas. (ZEIDEMANN, 2001; OLIVEIRA, 2007).

O ácido húmico é uma molécula complexa, com diferentes composições em sua cadeia. Sua composição química depende do processo de degradação e do tipo da matéria orgânica proveniente (WERSHAW, 1993). Apesar da sua complexidade, as soluções de ácido húmico têm sido tratadas em bancada por processos oxidativos avançados. Os resultados apresentam potencial de remoção e capacidade de coagulação dos sólidos suspensos totais (ZHANG, WU e LI, 2012)

Porém, a maioria dos resultados apresentados na literatura sobre o tratamento foram originados a partir de estudos experimentais (KUMAR, KUMAR e PANDIT, 2000; BOKHARI, et al., 2017). Estes estudos foram importantes para mostrar o potencial de uso da cavitação hidrodinâmica. No entanto, eles trouxeram poucas informações sobre a otimização do fenômeno cavitacional a partir da variação das condições hidráulicas e da geometria da câmara de cavitação.

Assim, estudos computacionais, baseados na Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD), surgiram como ferramenta para melhorar o dimensionamento das câmaras de cavitação, de modo a potencializar o fenômeno (BASHIR et al., 2011; KULDEEP e SAHARAN, 2016; CAI et al., 2014; CONCLI, 2016; LI et al., 2017).

Tao et al. (2016) e Gogate, Tayal e Pandit (2007) apontaram a necessidade da realização de mais aplicações experimentais auxiliadas por simulações numéricas (CFD), com o intuito de facilitar as análises, o entendimento do fenômeno e a decorrente interpretação dos resultados.

Diante da importância da otimização das câmaras de cavitação hidrodinâmica para a remoção de cor de efluentes, e da necessidade de estudos experimentais em conjunto com simulações computacionais, este trabalho teve como objetivo avaliar a atividade cavitacional de câmaras constituídas por placas de orifício de diferentes espessuras para a remoção de cor de uma solução de ácido húmico. Para tanto, o trabalho foi dividido em cinco etapas: 1. Validação das simulações computacionais (monofásicas e bifásicas) a partir de resultados experimentais obtidos em um aparato experimental em escala de bancada; 2. Definição da pressão de entrada ótima na câmara de cavitação; 3. Definição da espessura ótima da placa, de modo a produzir maior atividade cavitacional; 4. Uso da cavitação hidrodinâmica para a remoção de cor da solução de ácido húmico à 100 ppm; 5. Analisar e comparar os resultados experimentais e computacionais, a fim de otimizar câmaras cavitacionais.

2 **OBJETIVOS**

2.1 OBJETIVO GERAL

Otimizar uma câmara de cavitação hidrodinâmica para remoção de cor de uma solução de ácido húmico.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Determinar o modelo que melhor se aplica a cavitação hidrodinâmica;
- b) Prever o comportamento hidráulico do fenômeno cavitacional;
- c) Degradar a solução de ácido húmico;
- d) Determinar relações entre os resultados experimentais e computacionais;
- e) Definir parâmetros de validação do modelo computacional por meio dos resultados experimentais.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 CAVITAÇÃO HIDRODINÂMICA

3.1.1 O fenômeno cavitacional

A cavitação hidrodinâmica é um fenômeno causado pela variação de pressão em diferentes seções de um escoamento (GOGATE, 2007). O fenômeno baseia-se na geração, crescimento e implosão de microbolhas de vapor de água, e a decorrente formação de picos de alta pressão e temperatura (GOGATE, 2002; MONTUSIEWICZ et al., 2017; HILARES, et al., 2017; CARPENTER, GEORGE e SAHARAN, 2017).

A dinâmica do fenômeno pode ser resumida pelo escoamento de um líquido por uma constrição, como placas de orifício e tubos Venturi (GOGATE e PANDIT, 2001). Quando o líquido passa pela constrição, a velocidade do escoamento aumenta e, consecutivamente, a pressão cai. Com a queda abaixo da pressão de vapor do líquido, inicia-se a formação das microbolhas. A partir da recuperação da pressão, após a região da constrição, as microbolhas implodem e liberam energia, principalmente, em forma de calor e pressão. (BASHIR et al., 2011; TAO et al., 2016; MANCUSO, LANGONE e ANDREOTTOLA, 2017). Segundo Porto (2006), no momento da implosão, as superfícies em contato sofrem processos erosivos por conta de sua exposição à uma tensão de tração extremamente elevada, repetidas vezes.

Atualmente, a cavitação ainda é vista por muitos apenas como um problema hidráulico a ser combatido. Quando bombas e sistemas que trabalham sob pressão são dimensionados (principalmente em sistemas não afogados), o NPSH (*Net Positive Suction Head*) do sistema é verificado a fim de evitar o seu desenvolvimento e garantir a maior durabilidade dos equipamentos.

3.1.2 Fundamentos hidráulicos

Para a ocorrência da cavitação hidrodinâmica obrigatoriamente o fluido deve sofrer variações de pressão. Na Figura 1 é ilustrado um esquema de como o fenômeno se desenvolve no decorrer da câmara cavitacional. Cada fase do fenômeno foi dividida em seções.

A seção 1 representa o escoamento desenvolvido a partir de uma pressão de entrada. A pressão nessa seção depende principalmente do sistema de recalque aplicado ao aparato. Quanto maior a energia fornecida, maior a capacidade de formação das microbolhas.

Na seção 2 tem início a queda de pressão devido ao estrangulamento da seção. Pela equação da continuidade, equação 1, obrigatoriamente a velocidade do fluido tende a aumentar

a partir da diminuição da área do escoamento em uma vazão constante. Conforme a velocidade aumenta, segundo a equação de Bernolli, equação 2, para haver um equilíbrio, é necessário a diminuição da pressão. Quando ela diminui a ponto de ser inferior à pressão de vapor do líquido, as microbolhas se formam e dão início ao fenômeno cavitacional.



Figura 1 - Esquema da ocorrência do fenômeno cavitacional e do perfil de pressão

Fonte: do Autor, 2018

 $Q = v.A \tag{1}$

$$\frac{P_1}{\gamma} + \frac{v_1^2}{2.g} + z_1 = \frac{P_2}{\gamma} + \frac{v_2^2}{2.g} + z_2$$
(2)

Nas quais, Q é vazão do sistema; $_{\nu}$ é a velocidade do escoamento; A é área da seção transversal do escoamento; $\frac{P}{\gamma}$ é a carga de pressão do sistema; $\frac{v^2}{2.g}$ é a carga cinética do escoamento; e, $_{z}$ é a carga de posição do sistema.

Na seção 3 ocorre o aumento da seção transversal. A velocidade do fluido começa a diminuir e consequentemente a pressão se recupera. Nessa fase as microbolhas começam a implodir devido ao aumento da pressão.

Na seção 4, por fim, o escoamento volta a se desenvolver e a pressão se tornar constante. A carga de pressão do escoamento é inferior à fornecida pelo sistema de recalque devido à perda de carga do sistema e ao próprio fenômeno cavitacional.

Um parâmetro hidráulico que pode ser utilizado para estimar a probabilidade de ocorrência e a intensidade da cavitação hidrodinâmica é o número cavitacional ou número de *Thoma* (GOGATE e PANDIT, 2001). O número cavitacional é adimensional e geralmente está relacionado as condições do escoamento, equação 3.

$$Cv = \frac{P_2 - P_v}{\frac{1}{2}\rho v_{est}^2}$$
(3)

Na qual, Cv é o número cavitacional; P_2 é a pressão de recuperação; P_v é a pressão de vapor do líquido; ρ é a massa específica do fluido; e, v_{est} é a velocidade na estrição do escoamento.

Gogate e Pandit (2001) afirmam que, em condições ideais, a cavitação hidrodinâmica tem início quando o número cavitacional é menor que 1. Quanto mais o número se aproxima de zero, maior é a probabilidade de ocorrência do fenômeno e maior sua intensidade.

3.1.3 Processos oxidativos gerados pela cavitação

Diversos autores consideram a cavitação hidrodinâmica com um processo oxidativo avançado (GAGOL, PRZYJAZNY e BOCZKAJ, 2018; PARSA E ZONOUZIAN, 2013; PARSA e ZONOUZIAN, 2013; RAUT-JADHAV et al., 2016). Diversos tipos de oxidações podem ocorrer durante o processo de degradação imposto pela cavitação hidrodinâmica. Entretanto, os tipos mais importantes são a decomposição do poluente por pirólise e a decomposição da água por pirólise envolvendo a produção de espécies químicas (GAGOL, PRZYJAZNY e BOCZKAJ, 2018).

A decomposição do poluente por pirólise geralmente ocorre dentro ou próximo da microbolha de vapor. Devido ao rápido aumento de pressão e temperatura, os poluentes próximos a implosão das microbolhas sofrem ruptura e se convertem em formas químicas menos agressivas. Entretanto, para que isso ocorra, a pressão de vapor do poluente deve ser similar a pressão de vapor da água. Desta forma, os poluentes são capazes de entrar nas

microbolhas e implodirem próximo a elas. A energia liberada permite a degradação da maioria dos poluentes que possuem ligações covalentes (SONG e LI, 2009).

A dissociação molécula da água ou de substâncias oxidativas (H₂O₂) por pirólise ocorre na fase líquida e envolve a maioria dos poluentes de baixa volatilidade (geralmente, com elevado peso molecular) e hidrofílicos. A energia resultante do colapso das microbolhas causa a pirolise da molécula da água, gerando radicais altamente reativos, •OH e •H. Os radicais formados reagem com as moléculas dos poluentes e permite a formação de compostos inorgânicos simples ou compostos orgânicos de baixa toxicidade (GAGOL, PRZYJAZNY e BOCZKAJ, 2018). A formação dos radicais é resumida pela equação 4.

$$H_2 O \to \bullet OH + \bullet H \tag{4}$$

Com o intuito de potencializar o processo cavitacional vários oxidantes podem ser adicionados para aumentar a eficiência de degradação dos compostos orgânicos (GAGOL, PRZYJAZNY e BOCZKAJ, 2018). O uso do peróxido de hidrogênio é utilizado como fonte de radicais hidroxilas, equação 5.

$$H_2O_2 \to 2 \bullet OH \tag{5}$$

Uma quantidade ótima do oxidante é geralmente ponderada experimentalmente, uma vez que a falta ou o excesso pode resultar em significativas perdas de eficiência no tratamento (PATIL e GOGATE, 2012). O excesso do peróxido pode gerar reações secundárias que formam radicais com potencial de degradação inferior, equação 6 (RAUT-JADHAV et al., 2016; BAGAL, M.V., GOGATE, 2013; PATIL, BOTE e GOGATE, 2014).

$$\bullet OH + \bullet OH \to H_2O_2 H_2O_2 + \bullet OH \to \bullet HO_2 + H_2O \bullet HO_2 + \bullet HO_2 \to H_2O_2 + O_2 \bullet OH + O_2 \to \bullet HO_2 + \bullet O$$
(6)

3.1.4 Usos da cavitação hidrodinâmica para desinfecção e degradação

Apesar da cavitação hidrodinâmica ser amplamente ser conhecida pelo seu elevado grau de deterioração de equipamentos hidráulicos, quando ela é aplicada em sistemas controlados ela é capaz de ser potencializada e utilizada para fins benéficos.

Devido a sua capacidade de criar ambientes inóspitos, a cavitação hidrodinâmica é direcionada para estudos que buscam a desinfecção e degradação de substâncias (SAVE, PANDIT e JOSHI, 1997; HUANG et al., 2013; RAUT-JADHAV et al., 2016; RAJORIYA, BARGOLE e SAHARAN, 2017).

Os primeiros estudos realizados foram voltados para comparação dos resultados entre a cavitação hidrodinâmica, ainda novidade no campo de pesquisa, com a cavitação ultrassônica, já conceituada na literatura (SAVE, PANDIT e JOSHI, 1997; GOGATE e PANDIT, 2001; JYOTI e PANDIT, 2001). A partir das pesquisas comparativas, a cavitação hidrodinâmica ficou conhecida por ser uma técnica tão eficaz quanto a cavitação ultrassônica, porém de maior simplicidade, mais barata e com maior eficiência energética.

Em seguida, os estudos se desenvolveram de maneira diferenciada quanto às vertentes da cavitação hidrodinâmica (CH) e da ultrassônica (CU). Mesmo a CU tendo servido como ponto inicial das pesquisas, ela perdeu credibilidade quanto a sua aplicação fora das escalas de laboratório. Diante dessa percepção a pesquisa começou a ser direcionada a CH, que ganhou credibilidade quanto ao uso em escalas maiores (JYOTI e PANDIT, 2001; PAWAR et al., 2017; TAO et al., 2016; GOGATE, TAYAL e PANDIT, 2006)

Diante da expansão dos estudos de cavitação hidrodinâmica, vertentes começaram a ser criadas. Em um dos seus primeiros estudos, Save, Pandit e Joshi (1997) analisaram a influência da pressão de entrada e como o número de vezes que a substância circula no sistema afeta na inativação das células microbianas. Eles observaram que havia um ponto ótimo de aplicação de pressão para a degradação das células. Apesar do aumento da pressão e da maior probabilidade de ocorrência da cavitação hidrodinâmica, constatou-se que haviam interferências que reduziam a eficiência do processo.

Kumar e Pandit (1999) deram início aos estudos de modelagem do fenômeno cavitacional em dispositivos hidráulicos. Eles concluíram que as diferenças de pressão de entrada e saída podem ser manipuladas de forma a aumentar a intensidade do fenômeno cavitacional e a induzir reações químicas. Baixas pressões de entrada e o gradiente de recuperação de pressão a jusante do dispositivo são capazes de romper células mais fracas e produzir substâncias emulsificantes.

Ainda na fase de transição das pesquisas voltadas a comparação entre a cavitação hidrodinâmica e ultrassônica, Moholkar, Kumar e Pandit (1999), elaboraram um estudo numérico comparativo entre as duas vertentes de cavitação. Eles observaram o mesmo que Save, Pandit e Joshi (1997), porém com a visão de que procedimentos computacionais permitem operar sistemas cavitacionais específicos. Além de prever a amplitude de pressão e

as temperaturas necessárias para o desenvolvimento de reações em sistemas de operações singulares.

Kumar, Kumar e Pandit (2000) começaram as pesquisas sobre os efeitos químicos que a cavitação hidrodinâmica era capaz de gerar, por meio da liberação de radicais hidroxilas. Foi um dos primeiros estudos que mostrou quantitativamente e qualitativamente o efeito das reações químicas na degradação de uma solução de iodeto de potássio. O estudo havia sido realizado apenas para dispositivos de cavitação ultrassônica até então.

Moholkar e Pandit (2001) criaram um sistema unificado que pudesse simular a dinâmica das bolhas em dois dispositivos específicos utilizados em reatores de cavitação hidrodinâmica, Venturi e placa de orifícios. Eles apontaram importantes resultados. Câmaras com placas de orifício são mais propícios para intensificar reações químicas, enquanto dispositivos venturi são mais indicados para processos de mistura com baixa pressão de entrada (de 15 a 25 bar);

Gogate (2002) buscou aplicar a cavitação como um tratamento suplementar no tratamento de água residuária, com enfoque em obter parâmetros ótimos de operação e geometrias que buscassem a máxima eficiência. A eficiência esteve diretamente relacionada com a magnitude da pressão de entrada, temperatura e número de radicais livres. Eles puderam ser manipulados de acordo com as necessidades de operação e os parâmetros geométricos da câmara. Ele destaca ainda que para um melhor conhecimento do fenômeno é necessário o uso da simulação computacional proporcionada pelo CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Mas que de modo geral, a cavitação hidrodinâmica pode ser aplicada a degradação de substâncias químicas no tratamento de águas residuárias, mesmo que a maioria dos estudos ainda é desenvolvida em escala de laboratório.

Jyoti e Pandit (2004) estudaram a eficiência da cavitação hidrodinâmica na degradação química de substâncias. A partir de seus resultados, eles observaram que o uso da cavitação hidrodinâmica reduz o consumo de desinfetantes químicos, como o peróxido de hidrogênio, ozônio ou qualquer outro agente oxidante. Destacaram também que o uso de técnicas hibridas apresentam eficiências superiores ao tratamento individual da cavitação. O agente oxidante torna o processo mais rápido e com maiores índices de degradação.

Wu, Ondruschka e Brautigam (2007) degradaram clorocarbonetos a partir do tratamento cavitacional. Os resultados foram conduzidos em escala de laboratório. A cavitação hidrodinâmica se mostrou eficiente em mineralizar o composto. Os parâmetros de pressão de entrada e a concentração inicial da substância apresentaram substancial contribuição para a degradação. A eficiência de degradação seguiu um decaimento com cinética de primeira ordem, chegando a valores de remoção de 55%.

Mezule et al. (2009) utilizou o tratamento com cavitação hidrodinâmica para remoção de *Escherichia coli*. Os resultados mostraram que em poucos minutos de tratamento, a eficiência de remoção foi acima de 75%.

Huang et al. (2013) estudou como a influência das concentrações iniciais, do pH da solução, da pressão de entrada e a geometria dos orifícios da placa afetam diretamente o potencial de degradação do *Chitosan*. Os principais fatores que influenciaram diretamente ao tratamento foram a concentração da solução, o pH, a pressão de entrada e a geometria da placa de orifícios. Constatou-se que longos períodos de exposição favoreceram ao tratamento. Entretanto, tempo extremamente longos, prejudicaram os resultados. A vantagem do método foi a alta taxa de remoção, baixo consumo energético, facilidade de obtenção do equipamento, capacidade de tratar grandes quantidades de soluções, além de não gerar riscos de contaminação ao meio ambiente.

Mancuso, Langone e Androttola (2016) verificaram a capacidade da CH em ser o prétratamento do excesso de lodo ativo. Constatou-se que elevadas temperaturas (acima de 35°C) facilitam o tratamento do lodo devido a sua maior solubilidade. Quanto maior a pressão de entrada aplicada, mais acelerado foi o processo de desintegração do lodo. Maiores valores de pressão de entrada acarretaram maior queda na pressão na estricção, o que gerou maiores forças cisalhantes agindo nas paredes das células. Outro resultado destacado foi a biodegradabilidade aeróbica causada pela cavitação hidrodinâmica. A cavitação pode ser utilizada como prétratamento para a digestão aeróbia, por aumentar a produção de biogás.

Li et al. (2017) produziram um trabalho voltado a comparação entre resultados computacionais e experimentais. Foi utilizado o CFD como ferramenta para simulação computacional. Experimentalmente foi degradado azul de metileno. Por não utilizar técnicas híbridas (uso de oxidantes), foi observada uma redução inferior a 5% na concentração inicial da solução, após 60 minutos. Entretanto, o CFD se apresentou como uma poderosa ferramenta para o entendimento do fenômeno e o desenvolvimento de diferentes tipos de câmaras.

Diante dos estudos listados, observa-se pontos chaves no desenvolvimento das pesquisas. No início, as pesquisas foram direcionadas ao entendimento do fenômeno a partir de um fenômeno similar (cavitação ultrassônica). Após a confirmação de sua versatilidade e menor custo de aplicação, a cavitação hidrodinâmica passou a ser mais estudada. Com o desenvolvimento das pesquisas, foi observado que alguns parâmetros influenciavam diretamente na eficiência do fenômeno, com o caso da pressão de entrada, geometria da câmara de cavitação, uso de agentes oxidantes, temperatura e tempo de exposição. Com o maior número de pesquisas, foi possível o maior entendimento do fenômeno. Entretanto, apesar da aplicação

em diversos tratamentos, haviam lacunas a serem preenchidas. O preenchimento começou a ser realizado em estudos numéricos do fenômeno. A ferramenta CFD passou a ser aliada do tratamento conduzido pelo fenômeno cavitacional. Porém, até o momento, poucas pesquisas buscam a interação entre os procedimentos computacionais e experimentais. A maioria dos estudos ainda conduzem os procedimentos de forma paralela, sem a interação entre os resultados.

3.2 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Toda simulação computacional realizada no estudo foi aplicada no software ANSYS. Neste item são elucidados os principais tópicos para o entendimento à cerca da simulação.

3.2.1 Plataforma ANSYS Inc.

O ANSYS foi fundado em 1970. Ele possui uma grande abrangência quanto a aplicações físicas de diversos fenômenos. A plataforma foi modelada de modo a atender simulações com uso de elementos finitos e volumes finitos, a depender da área de aplicação.

O objetivo da plataforma ANSYS é fornecer ao usuário a capacidade de prever e facilitar o entendimento dos fenômenos por meio da engenharia de simulações. A plataforma é provida de janelas de desenho geométrico, desenvolvimento de discretização de peças (*Mesh*) e diversos subprogramas para a realização das simulações, cada um com sua especificidade.

Diversos estudos apontaram as vantagens do uso da plataforma ANSYS para desenvolvimento de pesquisas e otimização de processos. No âmbito que compreende as simulações do fenômeno cavitacional, pesquisas conduzidas por Saharan e Kuldeep (2016) otimizaram a geometria das câmaras cavitacionais de dois tipos de reatores cavitacionais; Bashir et al. (2011) otimizou uma câmara cavitacional tipo venturi em diferentes geometrias para diferentes pressões; Jangir, Diwedi e Ghosh (2017) investigaram o fenômeno na contração da câmara. Eles utilizaram a simulação 3D para representar o fenômeno e obtiveram bons resultados quando comparados com os resultados experimentais.

Pawar et al. (2017) também investigou o fenômeno a partir das simulações e comparou com resultados experimentais. Entretanto as câmaras foram plotadas em geometrias 2D e mesmo assim foi possível obter parâmetros importantes que se correlacionaram aos resultados experimentais.

Assim como esses estudos, outros podem ser apontados. Entretanto, todos os encontrados até o momento apresentaram vantagens quanto ao uso dos resultados computacionais quando usados para melhor entendimento dos resultados experimentais.

3.2.2 Equações governamentais

O fenômeno cavitacional pode ser modelado com a equação de Navier-Stokes com médias de Reynolds (*Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations*), conhecida como RANS) e as equações que a complementam, como as de conservação de massa, modelos de turbulência e respectivas formas multifásicas dessas equações. (LI et al., 2017).

A equação da continuidade e os modelos multifásicos também foram aplicados para adaptar as equações de Navier-Stokes quando mais de uma fase é considerada no escoamento, uma vez que a fase de vapor não é capaz de descrever totalmente o comportamento do escoamento.

Equações de Navier-Stokes

Juntas, as equações 7 e 8 são as equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis. A equação (7, também conhecida como Equação de Momento de Cauchy, é a forma conservativa para a abordagem Euleriana.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\vec{v}) + \nabla .(\rho\vec{v}\vec{v}) = \nabla(\vec{\tau}) + \rho\vec{g}$$

$$\bar{\tau} = \mu \left[\left(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T \right) - \frac{2}{3} \nabla . \vec{v} I \right]$$
(8)

Em que, \bar{t} é o tensor viscoso equação 8, $\rho \vec{g}$ é a aceleração da gravidade. A constante μ é a viscosidade molecular e I é a unidade do tensor. O termo $\frac{2}{3}\nabla_{\vec{v}}\vec{v}$ da equação 8 representa o efeito da dilatação volumétrica.

Equação da conservação de massa

A equação da conservação de massa, ou continuidade, pode ser escrita conforme a equação 9.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla .(\rho.\vec{\nu}) = Sm \tag{9}$$

A equação 9 é válida tanto para escoamentos compressíveis e incompressíveis. A variável *Sm* corresponde a massa adicionada ao escoamento pela dispersão da segunda fase dispersa (ANSYS, 2011).

Quando escoamento é incompressível a equação reduz para equação 10.

$$\nabla .(\vec{\nu}) = 0 \tag{10}$$

Modelo Turbulento k-ω (SST)

Os modelos de duas-equações são amplamente utilizados devido a sua capacidade numérica e a acurácia computacional. Os modelos k- ε e k- ω são modelos de duas-equações que utilizam a hipótese de um gradiente de difusão associado às tensões de Reynolds para os gradientes de velocidade média e viscosidade turbulenta. Nas duas equações a velocidade escalar turbulenta é computada a partir da energia cinética turbulenta (k), que é obtida a partir da solução das equações de transporte equações 9 e 10. O comprimento escalar turbulento é estimado a partir de duas propriedades intrínsecas do fenômeno turbulento, energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação turbulenta. A última é obtida também pelo desenvolvimento das equações de transporte (ANSYS, 2011).

O modelo k- ω SST é uma combinação dos pontos positivos dos modelos k- ε e k- ω *standard*. Enquanto o modelo k- ε pode prever o comportamento geral do escoamento com acurácia, o modelo k- ω é capaz de predizer a influência de parede do escoamento. O modelo k- ω SST também trabalha com um sistema de duas equações, equações 11 e 12, além da inserção de um novo termo de taxa de dissipação (LAM et al., 2012; ANSYS, 2011).

A proposta do modelo é melhorar a acurácia da previsão do comportamento do fluido, com grandes variações do gradiente de pressão, como é o caso da cavitação hidrodinâmica. Entretanto o modelo k- ω SST é restrito a escoamentos permanentes, com o propósito de alcançar a eficiência computacional e a acurácia nas previsões (LAM et al., 2012).

$$\frac{\partial\rho k}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V_x k)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y k)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_z k)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial z} \right] + \min(\mu_t \phi, C_{lmt} \varepsilon) - C_\mu \rho k \omega + \frac{C_4 \beta \mu_t}{\sigma_k} \left(g_x \frac{\partial T}{\partial x} + g_y \frac{\partial T}{\partial y} + g_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)$$
(11)

$$\frac{\partial\rho\omega}{\partial t} + \frac{\partial(\rho V_x \omega)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V_y \omega)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho V_z \omega)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial\omega}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial\omega}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial\omega}{\partial z} \right] + \gamma_2 \rho \phi - \beta_2 \rho \omega^2 + \frac{(1 - C_3)\beta\rho}{\sigma_{k2}} \left(g_x \frac{\partial T}{\partial x} + g_y \frac{\partial T}{\partial y} + g_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)$$
(12)

$$(1-F_1)2\rho\sigma_{\omega 2}\left[\frac{\partial k}{\partial x}\frac{\partial \omega}{\partial x}+\frac{\partial k}{\partial y}\frac{\partial \omega}{\partial y}+\frac{\partial k}{\partial z}\frac{\partial \omega}{\partial z}\right]$$

O modelo turbulento k- ω SST, presente na plataforma do FLUENT (ANSYS, 2011), fixa os valores dos coeficientes de fechamento do modelo turbulento em:

$$C_{lmt} = 10^{15}; \sigma_k = 1,176; \sigma_{\omega} = 2,0;$$

$$\gamma = 0,5532; \beta' = 0,075; \sigma_{k2} = 1,0;$$

$$\sigma_{\omega 2} = 1,168; \gamma_2 = 0,4403; \beta'_2 = 0,0828$$

Os valores dos coeficientes σ_{ω} , $\beta' \in \beta'_2$ adotados pelo modelo também foram citados por Hu, Wang e Wang (2014).

Modelo cavitacional – Modelo de Schnerr e Sauer

Com base no modelo geral de cavitação proposto por Singhal et al. (2002), o modelo Schnerr-Sauer (2001) segue uma abordagem similar para transferência de massa líquido-vapor. O modelo é robusto o suficiente para contabilizar a mudança da fase vapor para líquida e viceversa (LIDTKE, HUMPHREY e TURNOK, 2016). Ele prevê efeitos de coalescência, mesmo que o modelo de Schnerr-Sauer ignore as distorções dos núcleos de vapor e dependa apenas da densidade das cavidades.

O equacionamento é baseado na fórmula geral da fração de volume de vapor, equação 13.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha\rho_{v}) + \nabla(\alpha\rho_{v}\vec{V}) = \frac{\rho_{v}\rho_{l}}{\rho_{m}}\alpha(1-\alpha)\frac{3}{R_{b}}\sqrt{\frac{2}{3}\frac{P_{v}-P_{\infty}}{\rho_{l}}}$$
(13)

Os termos, ρ_v , ρ_l e ρ_m , da equação 13 são as densidades de vapor, do líquido e a de mistura, respectivamente. O termo α é definido pela equação 14, n_b é a densidade da bolha,
P_{v} é a pressão de saturação do vapor, P_{∞} é a pressão de campo distante e R_{b} é o raio da microbolha.

$$\alpha = \frac{n_b \frac{4}{3} \pi R_b^3}{1 - n_b \frac{4}{3} \pi R_b^3} \Longrightarrow R_b = \sqrt[3]{\frac{\alpha}{1 - \alpha} \frac{3}{4 \pi n_b}}$$
(14)

3.3 ÁCIDO HÚMICO

3.3.1 Contextualização

Segundo Caron, Graças e Castro (2015), substâncias húmicas (SH) são "compostos orgânicos oriundos da decomposição de resíduos vegetais e animais do ambiente". Elas afetam diretamente na composição dos ambientes, de modo a influenciar no crescimento e no metabolismo de plantas. Os micronutrientes presentes no ácido húmico são os principais responsáveis por influenciar no crescimento e metabolismo das plantas, além dos cátions que são liberados pelas próprias SH.

Uma das formas das substâncias húmicas são as substâncias húmicas aquáticas (SHA). Elas podem ser de origens alóctones ou autóctones. Na primeira, a fonte de obtenção das SHA é por meio da lixiviação ou erosão de solos e transportadas para corpos hídricos. Na segunda, elas são advindas de compostos celulares e da degradação de organismos aquáticos vivos (OLIVEIRA, 2007).

De acordo com sua capacidade de solubilidade em meio aquoso, as SH podem ser divididas em três principais partes, ácidos húmicos, fúlvicos e humina (OLIVEIRA, 2007). Elas podem ter diferentes massas atômicas, desde centenas até milhares de unidades (ROCHA e ROSA, 2003). Embora haja grande dificuldade à degradação química e biológica (SCHULTEN e SCHINTZER, 1995), apenas há 30 anos elas têm sido estudadas mais a fundo. O aumento da preocupação com a qualidade química da água de abastecimento é um dos fatores primordiais ao aumento do interesse nesse campo de estudo (ROCHA e ROSA, 2003).

Apesar das substâncias húmicas apresentarem grande importância ambiental, elas atribuem aos corpos hídricos elevados índices de cor. Para o abastecimento público, ela é um dos principais parâmetros estéticos de aceitação. A Portaria 518 estabelece que, para o consumo humano, o parâmetro de cor deve se enquadrar com valores máximos permitidos em 15 uH (unidades Hazen) (BRASIL, 2004).

Um exemplo de corpo hídrico que sofre pela alta concentração de ácido húmico é o Rio Negro. As substâncias húmicas representam aproximadamente 50% dos 600-900 µmol/L de matéria orgânica dissolvida. Os ácidos orgânicos são provenientes do escoamento lateral de água, que carreia as substâncias geradas pela decomposição de restos vegetais nos solos do médio e alto Rio Negro. A baixa concentração de nutrientes, a acidez e a alta contaminação de mercúrio do rio impossibilitam que ele seja explorado para consumo, restando apenas a exploração turística e ecoturística como fonte de recursos (ZEIDEMANN, 2001; OLIVEIRA, 2007).

A cidade de São Gabriel da Cachoeira Ribeirinha é abastecida com a água turva do Rio Negro. A água é captada diretamente do rio e distribuída sem tratamento. A água possui elevados índices de cor, baixos teores de nutrientes e acidez marcante em seu gosto (GIATTI e CUTOLO, 2012). Segundo o SNIS (2018), de 2011 até 2016 foram contabilizadas mais de 180 amostras fora dos padrões de turbidez previstos em norma.

3.3.2 Composição química

As substâncias húmicas possuem características amorfas, escuras e com vasto conteúdo de funções orgânicas: grupos carboxílicos, fenólicos, enólicos, alcoólicos, quinonas. Elas possuem massa molar variável de acordo com sua origem, grau e mecanismo de decomposição. Podem variar de centenas a milhares de unidades de massa atômica (OLIVEIRA, 2007).

Devido à enorme diversidade em sua composição, as SH ainda não possuem um modelo estrutural definido. A sua indefinição não ocorre exclusivamente por sua complexidade, mas também a falta de identificação estrutural genérica (OLIVEIRA, 2007).

Apesar da dificuldade em definir as características estruturais das SH, é possível compará-las com os grupos funcionais que produzem a lignina. O diferencial está no maior número de grupos funcionais de ácidos carboxílicos. As moléculas em si são semelhantes às micelas, possuem duas partes: hidrofílica (parte externa) e hidrofóbica (parte interna) (WERSHAW, 1993).

4 MATERIAIS E MÉTODOS

A fim de garantir maior clareza e entendimento, a metodologia foi dividida em duas etapas. Uma etapa computacional e outra experimental.

A etapa computacional corresponde ao métodos e considerações adotadas durante as simulações. Entretanto, para o início da etapa computacional, foram necessários dados de entrada *(inputs)*. Os dados foram obtidos por vias experimentais, e para facilidade de explicação esse é o único item experimental que está dentro dos procedimentos computacionais.

Na etapa experimental, são apresentadas as metodologias utilizadas para a degradação do ácido húmico, desde a preparação das amostras até os testes de espectroscopia.

4.1 O APARATO

O aparato de cavitação (Figura 2) é composto de um reservatório com capacidade de 9 litros, duas bombas centrífugas em série (KSB, Hydrobloc P, 0,5 HP e Thebe, TH16S, 3HP), uma placa de orifício, registros de controle de vazão, medidores de pressão e tubulações de 32 mm de diâmetro. Após o bombeamento, o excedente de água volta ao reservatório por um bypass, regulado pelo registro R1.

Figura 2 – Aparato de cavitação hidrodinâmica. A- Reservatório; B- Trocador de calor; C-Câmara de cavitação; D- Medidor de vazão tipo placa de orifício; E- Medidor de pressão digital.



Fonte: do Autor, 2018

O by-pass controla a vazão de entrada na câmara e a consequente variação de pressão. Os medidores P1 (±10kPa) e P2 (±0,13kPa) quantificam as pressões de entrada e saída da placa de orifício. Em C fica alocada a câmara de cavitação. Nela, as placas utilizadas no estudo foram trocadas a cada ensaio. A placa da Figura 2 é de 3mm de diâmetro e 8mm de espessura.

Antes do início dos procedimentos computacionais foi necessária a mensuração das vazões do sistema em 10 condições hidráulicas diferentes. Cada condição é representada pelo par de pressão (P1 e P2) e vazão do escoamento, Tabela 1. As medidas de vazão (placa de orifício calibrada em ensaios anteriores Cd = 0,67) foram repetidas cinco vezes.

As temperaturas dos experimentos giraram em torno de 25°C e foram controladas por um trocador de calor composto de tubulação de cobre e bomba para recirculação de água fria.

A intensidade da cavitação foi definida por meio do número de cavitação (Cv), equação 15.

$$Cv = \frac{P_2 - Pv}{0.5\rho . v_0^2}$$
(15)

Em que, Pv é a pressão de vapor do líquido (5,59 kPa), ρ é a massa específica do líquido, e v₀ é a velocidade do escoamento no orifício.

| Simulação | P ₁ [kPa] | P ₂ [kPa] | Q [L/s] | Cv [-] |
|-----------|----------------------|----------------------|-------------------|--------|
| 1 | 50 | 1,11 | 0,0543±0,0002 | 3,03 |
| 2 | 110 | 2,90 | $0,0759\pm0,0004$ | 1,58 |
| 3 | 230 | 6,05 | 0,1091±0,0005 | 0,79 |
| 4 | 300 | 7,17 | 0,1249±0,0007 | 0,61 |
| 5 | 360 | 8,52 | 0,1303±0,0010 | 0,57 |
| 6 | 480 | 10,63 | $0,1459\pm0,0012$ | 0,47 |
| 7 | 570 | 12,48 | 0,1542±0,0012 | 0,42 |
| 8 | 630 | 12,22 | $0,1676\pm0,0057$ | 0,36 |
| 9 | 680 | 12,97 | 0,1705±0,0012 | 0,35 |
| 10 | 730 | 13,47 | 0,1722±0,0023 | 0,34 |

Tabela 1 – Condições experimentais do fenômeno cavitacional

Fonte: do Autor, 2018

O número total de 10 cenários foi de acordo com a capacidade do sistema de recalque. Com todos os registros abertos, a máxima pressão atingida foi 730 kPa.

4.2 ETAPA COMPUTACIONAL

4.2.1 Teste de independência de malhas (TIM)

Antes de dar início a qualquer validação foi realizado o teste de independência de malhas. Qualquer simulação realizada pela dinâmica de fluídos computacional (CFD) é sensível a malha aplicada à geometria em estudo. A malha ideal é aquela em que os resultados obtidos pelas simulações não variam significativamente com a mudança do número de elementos (BASHIR et al., 2011; KUMMITHA, 2017; NADA, FOUDA, ELATTAR, 2016).

Para o teste de independência de malhas foi fixada a geometria da placa com orifício de 3mm de diâmetro e 8mm de espessura (Figura 3) e a pressão de entrada e saída do aparato em 570 kPa e 13,47 kPa, respectivamente (Simulação 7, Tabela 1). A faixa de pressão foi escolhida por ser a faixa máxima que o sistema atingiu com uma única bomba. Antes do sistema possuir duas bombas centrífugas em série, o sistema possuía apenas uma bomba, que era capaz de atingir no máximo a pressão de entrada de 570 kPa para as condições de perda de carga.

Tomou-se como parâmetro comparativo a vazão, em L/s. A partir do ponto em que a densidade de elementos foi suficiente para estabilizar a vazão do sistema, os perfis de pressão e velocidade também foram verificados.

Como um dos objetivos do trabalho foi a verificação de qual modelo representaria melhor os dados obtidos experimentalmente no item 4.1.2, o teste de independência foi realizado tanto com modelo monofásico quanto com bifásico, na geometria apresentada na Figura 3. Para melhor clareza de como é a interface do *Mesh Designer*, no Apêndice A está apresentado o layout de modelagem.





Fonte: do Autor, 2018

TIM - Modelo monofásico

Mesmo com ciência de que o fenômeno cavitacional apresenta duas fases, uma líquida e outra vapor, o objetivo da verificação do modelo monofásico foi reduzir o custo computacional durante as simulações e obter os parâmetros hidráulicos necessários para melhor entendimento do fenômeno.

O modelo monofásico possui a capacidade de simular os fenômenos hidráulicos turbulentos, sem a inserção das variáveis multifásicas, com número reduzido de equações e de tempo entre as iterações do modelo.

As variações de densidades foram obtidas pela aplicação de diferentes faixas de *Growth Rate* existentes no *Mesh Designer*. Os demais parâmetros foram fixados conforme segue na Tabela 2.

| Função | Qualidade |
|-------------------|---------------------|
| Advan. Size Func. | Proximity and curv. |
| Relevance Center | Fine |
| Initial Size Seed | Full Assembly |
| Smoothing | High |
| Transition | Slow |
| Span Angle Center | Fine |

Tabela 2- Parâmetros de mesh fixados durante o teste de independência de malhas

Fonte: do Autor, 2018

Os valores de *Growth Rate* variaram entre 5,00 e 1,03. Para a realização do teste, o modelo adotado foi o monofásico turbulento k-ω SST e o método numérico SIMPLEC *standard* com inicialização híbrida. O número total de iterações foi de 5000.

TIM - Modelo bifásico

De maneira similar ao realizado para o modelo monofásico, o modelo bifásico possuiu os mesmos parâmetros de *Mesh* apresentados na Tabela 2. Os valores de *Growth Rate* foram iniciados a partir da densidade de estabilização obtida pelo modelo monofásico. As pressões de entrada e saída foram as mesmas, assim como os modelos turbulento e numérico. A diferença foi a inclusão do modelo multifásico MIXTURE. O objetivo foi verificar se, mesmo com a mudança do modelo monofásico para o bifásico, a densidade de malha ainda seria capaz de representar os resultados.

4.2.2 Validação dos modelos

Com a densidade de malha ideal para ambos os modelos, foi verificado qual melhor se ajustaria a simulação do fenômeno cavitacional. Para isso, novamente foram utilizados os parâmetros obtidos na Tabela 1 e a geometria da Figura 3. Da mesma forma como foram obtidos 10 dados experimentais diferentes de pressão de entrada e saída, foram realizadas 10 simulações para cada modelo. A adoção do melhor modelo se deu pelo erro relativo (E_{relativo}) que cada simulação apresentou quando comparado com os valores de vazão obtidos experimentalmente, conforme a equação Na qual, X_{modelo} é a vazão obtida pela simulação e X_{experimental} é a vazão média experimental.

$$E_{relativo} = \left| \frac{X_{modelo} - \overline{X}_{experimental}}{\overline{X}_{experimental}} \right| .100 \quad Na \text{ qual, } X_{modelo} \text{ é a vazão obtida pela simulação} \\ e \text{ Xexperimental é a vazão média experimental.}$$
(16)

Para maior clareza, as adoções realizadas são apresentadas a partir das interfaces do programa juntamente com os modelos adotados.

Na Figura 4 são apresentadas as interfaces para implementação da simulação. Nota-se que para cada pressão são criadas "caixas de simulação" diferentes.

Figura 4 – Interface do Workbench do ANSYS



Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Na Figura 5 é apresentado o Setup do Fluent. Nele foram definidos todos os parâmetros de simulação: condições gerais do escoamento, modelos turbulentos, materiais, condições de contorno, valores de referência, métodos numéricos de solução, tipo de inicialização e outros.

Cada parâmetro foi definido de acordo com as condições do fenômeno. As diferenças entre o modelo monofásico e bifásico foram definidas nos tópicos de modelos, materiais e fases (desabilitado na Figura 5).

Para cada opção de Setup, os tópicos são detalhados e explicados conforme as adoções necessárias.



Figura 5 – Setup do Fluent

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Na Figura 6 foram escolhidas as opções gerais do escoamento e a verificação dos erros da malha em *Report Quality*. A principal adoção foi o escoamento permanente (*Steady*), na função tempo.

| Problem Setup | |
|---|---|
| Models Materials Phases Cell Zone Conditions Boundary Conditions Mesh Interfaces Dynamic Mesh | Mesh Scale Check Report Quality Display Solver Type Velocity Formulation © Pressure-Based © Absolute |
| Solution | Obensity-based Orkeauve |
| Solution Methods Solution Controls Monitors Solution Initialization Calculation Activities Run Calculation | Time Steady Transient Gravity Units |
| Results Graphics and Animations Plots Reports | нер |

Figura 6 – Opções gerais da simulação

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Na Figura 7 são apresentados os modelos adotados para o escoamento. Nota-se que apenas o modelo *Viscous* não está *Off*, isso indica que nenhum modelo está sendo implementado além do modelo *Turbulento k-ω SST/Low-Re Corrections/Curvature Correction*.

Figura 7 - Modelos a serem adotados

| Problem Setup | Models | | |
|-------------------------|---|----------------------------------|------------------------|
| General | Energy - Off | | |
| Models | Viscous - SST k-omega | | |
| Materials | Heat Exchanger - Off | | |
| Phases | Species - Off | Viscous Model | × |
| Cell Zone Conditions | Discrete Phase - Off Solidification & Melting - Of | Viscous Moder | ^ |
| Boundary Conditions | Acoustics - Off | Model | Model Constants |
| Mesh Interfaces | Eulerian Wall Film - Off | | Alpha*_inf |
| Dynamic Mesh | | | 1 |
| Reference Values | | k-ensilon (2 eqn) | aluba inf |
| Solution | | k-omega (2 eqn) | Apna_nr |
| Calution Matheda | | O Transition k-kl-omega (3 eqn) | 0.52 |
| Solution Methods | | O Transition SST (4 eqn) | Alpha_0 |
| Solution Controls | 1 | Scale-Adaptive Simulation (SAS) | 0.11111 |
| Monitors | | O Detached Eddy Simulation (DES) | Beta* inf |
| Solution Initialization | | Large Eddy Simulation (LES) | 0.09 |
| Calculation Activities | | k-omega Model | · · · · · |
| Run Calculation | | Ostandard | User-Defined Functions |
| Results | | ● SST | Turbulent Viscosity |
| Graphics and Animations | | k-omega Options | none 🗸 |
| Plots | | VI ow-Re Corrections | Prandtl Numbers |
| Reports | | | ^ |
| | | Options | |
| | | Curvature Correction | |
| | | | ~ |
| | | | |
| | | OK | Cancel Help |

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

No caso das simulações bifásicas, a opção *Multiphase* também foi ativada e escolhido o modelo *Schnerr e Sauer*.

Na Figura 8 é ilustrada a janela para inserção dos materiais e fluidos. Nas simulações monofásicas, o único fluido adicionado foi a água líquida (*water-liquid*). Já para o caso das simulações bifásicas ocorreu a adição do vapor de água (*water-vapour*).

Figura 8 - Escolha dos materiais e fluidos de simulação



Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

O passo representado na Figura 9 foi exclusivo das simulações bifásicas. Nessa fase foi indicado ao programa como se daria a interação entre a fase líquida (*phase-1*), e a fase de vapor (*phase-2*). A indicação foi feita na aba Massa (*Mass*) pela adoção de *Cavitation* na lista suspensa Mecanismo (*Mechanism*), destacado em amarelo.

Vale salientar que a sequência das fases interfere diretamente na sua interação. Como o fenômeno cavitacional é a passagem da fase líquida para a fase de vapor, essa foi a sequência respeitada, como destacado em vermelho.

| | Dhanna | |
|---------------------------------------|---|--------|
| Problem Setup | Phases | |
| General | phase-2 - Secondary Phase | |
| Models | | |
| Materials Phases | Primary Phase | × |
| Cell Zone Conditions | Name | |
| Boundary Conditions | phace-1 | _ |
| Mesh Interfaces | | |
| Dynamic Mesh | Phase Material water liquid | |
| Reference Values | water-liquid V | |
| Solution | OK Cancel Help | |
| Solution Methods Solution Controls | | _ |
| Monitors | | |
| Solution Initialization | | |
| Calculation Activities | Edit Interaction ID | |
| Run Calculation | | |
| Results | | |
| Graphics and Animations | Phase Interaction | × |
| Plots | | |
| Reports | Drag Lift Collisions Slip Heat Mass Reactions Surface Tension Discretization Interfacial Area | 3 |
| | Number of Mass Transfer Mechanisms 1 | |
| | Mass Transfer | |
| | From To Phase Phase Mechanism | ^ |
| | 1 phase-1 v phase-2 v cavitation v Edit | |
| | | |
| | | |
| | | |
| | J | \vee |

Figura 9 - Interação entre as duas fases no modelo bifásico

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Na Figura 10 é apresentado layout para a inserção das condições de contorno da simulação. A partir deste comando que as condições de contorno foram variadas em cada uma das 10 simulações realizadas para cada modelo.

As pressões predefinidas na Tabela 1, foram inseridas no campo de pressão total (*Gauge Total Pressure*) e o restante das adoções seguiram o padrão fornecido pelo modelo.

Para as pressões de saída foram realizados os mesmos procedimentos, com mudança apenas da opção *inlet* para opção *outlet* da aba *Zone - Boundary Conditions* (destacado em azul), Figura 11.

Pressure Inlet one Name Boundary Conditio inlet Problem Setup Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase UDS Zone General Models Reference Frame Absolute ~ Materials interior-solid Gauge Total Pressure (pascal) 50000 constant ¥ outlet Phases wall Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal) 49970 constant Cell Zone Conditions ~ Boundary Conditions Direction Specification Method Normal to Boundary Mesh Interfaces Turbulence Dynamic Mesh Specification Method K and Omega v **Reference Values** Turbulent Kinetic Energy (m2/s2) 0.02 constant v Solution Specific Dissipation Rate (1/s) constant v Solution Methods Solution Controls Help OK Cancel Monitors Solution Initialization Calculation Activities pressure-inlet ~ Run Calculation axis Results Type ID exhaust-fan Graphics and Animations hixture pressure-inlet 5 inlet-vent ~ intake-fan Plots interface Reports Edit... Profiles... Copy mass-flow-inlet outflow Parameters... Operating Conditions... outlet-vent pressure-far-field Display Mesh... Periodic Conditions... SUITE pressure-outlet Highlight Zone symmetry velocity-inlet wall

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Figura 11 - Condições de contorno para pressão de saída

| Pressure Outlet | | > | ζ |
|--|--------------------|-----------------------|---|
| Zone Name outlet | | | |
| Momentum Thermal Radiation Species | DPM Multiphase UDS | ; | |
| Gauge Pressure (pasca | l) 1112 | constant ~ | |
| Backflow Direction Specification Metho | Normal to Boundary | ~ | |
| Radial Equilibrium Pressure Distribution Average Pressure Specification Target Mass Flow Rate Turbulence | | | |
| Specification Method | K and Omega | ~ | |
| Backflow Turbulent Kinetic Energy (m2/s2) | 0.02 | constant \checkmark | |
| Backflow Specific Dissipation Rate (1/s) | 1 | constant \lor | |
| OF | Cancel Help | | |

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Na Figura 12 são apresentados os métodos de solução numérica.

Figura 10 – Condições de contorno





Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

São disponíveis 4 métodos numéricos para os pares de pressão-velocidade (*pressure-velocity coupling*): SIMPLE, SIMPLEC, PISO e Coupled. Para a validação dos modelos

bifásicos e monofásicos foi adotado o método SIMPLEC. É valido destacar que para cada caso existe um método mais indicado. O *SIMPLEC* foi adotado, pois foi o que apresentou maior estabilidade quanto às simulações bifásicas.

Para a solução da discretização espacial do escoamento, os tópicos são subdivididos pelo programa em gradiente, pressão e momento. Para cada um deles foi adotado o *default* do método *SIMPLEC*. Cada método possui uma combinação de discretizações espaciais. As combinações estão intrínsecas a programação do *Fluent*, que para o escopo da pesquisa não é valido maior detalhamento.

Na Figura 13 é ilustrado o menu para escolha do tipo de inicialização da solução numérica (entende-se como o chute inicial para o início da simulação). Na opção de inicialização híbrida (*Hybrid Initialization*) o próprio algoritmo do *Fluent* gera valores com base nos dados de condições de contorno aplicadas. A inicialização padrão (*Standard Initialization*) necessita a inserção manual desses dados específicos intrínsecos ao escoamento, e quando estão distantes dos valores ideais, dificultam a convergência da simulação. Principalmente quando a simulação é realizada com o modelo bifásico.





Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Na Figura 14 é apresentada a última tela antes do início da simulação. Nela foi escolhida apenas o número de iterações (*number of iterations*) que a simulação iria realizar. Caso, no início (Figura 6) o escoamento adotado fosse transiente, nessa etapa, outras opções como intervalo de tempo e passo de tempo iriam estar habilitadas ao invés de número de iterações.

Figura 14 – Início da simulação



Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

Para finalizar, a Figura 15 ilustra a tela de residuais entre cada simulação. Quanto mais próximo o resultado estiver da convergência, menor irá ser o número de residual entre as iterações.



Figura 15 - Layout das iterações entre os residuais escalares

Fonte: ANSYS, modificado pelo Autor (2018)

4.2.3 Análise dos perfis de pressão

A atividade cavitacional ideal é produzida por câmaras de cavitação capazes de gerar o maior número possível de cavidades sem que ocorra a coalescência entre essas cavidades. A coalescência conduz a formação de nuvens de cavidades, as quais reduzem a intensidade de colapso das microbolhas e a liberação de energia na forma de calor e pressão (GOGATE, 2002; BATISTA et al., 2015; MONTUSIEWICZ et al., 2017; HILARES, et al., 2017; CARPENTER, GEORGE e SAHARAN, 2017). Diante dessa observação, Kuldeep e Saharan (2016) definiram que, para uma geometria fixa, a existência de uma atividade cavitacional ótima depende de dois aspectos principais: elevado número de cavidades e intensidade da zona de cavitação (zona de baixa pressão).

Como a pressão é um dos fatores mais preponderantes a ocorrência do fenômeno cavitacional (SAVE, PANDIT e JOSHI, 1997; MOHOLKAR e PANDIT, 2001), foi realizado uma análise específica entre os 10 perfis de pressão listados na Tabela 1. O objetivo dessa etapa foi determinar qual pressão forneceria condições hidráulicas para potencializar o fenômeno cavitacional. Foram escolhidos 3 parâmetros hidráulicos principais: número zonas de baixa pressão, taxa de recuperação de pressão após estricção e intensidade das zonas de baixa pressão.

Para fins de clareza, a Figura 16 ilustra um perfil de pressão simulado. Os perfis são plotados no plano YZ. O sentido do escoamento é da esquerda para direita. A zona de baixa pressão citada anteriormente foi destacada com linha tracejada na figura. Quanto mais zonas de baixa pressão, mais intensas e maior a taxa de recuperação, mais propícia é a ocorrência do fenômeno cavitacional. A taxa de recuperação de pressão também será analisada com auxílio de gráficos.

Figura 16 – Exemplo de perfil de pressão e os parâmetros hidráulicos observados. Em destaque a zona de baixa pressão



Fonte: do Autor, 2018

4.2.4 Otimização de placas

Após a escolha do melhor modelo e da pressão mais preponderante para a ocorrência do fenômeno, criou-se cenários com 5 placas de orifícios distintas, Figura 17. O objetivo dessa etapa foi determinar qual placa apresenta melhores condições hidráulicas para potencializar o fenômeno cavitacional.

As disposições geométricas das placas apresentadas Figura 17 foram escolhidas de modo a verificar a influência da espessura das placas (placas A, B e C) e a distribuição dos jatos (placas D e E).

Figura 17 – Placas utilizadas nas simulações. Placa A: espessura de 1mm, diâmetro de orifício de 3mm; Placa B: espessura de 8mm, diâmetro de orifício de 3mm; Placa C: espessura 15mm, diâmetro de orifício de 3mm; Placa D: espessura de 1mm, 9 orifícios, diâmetro dos orifícios de 1mm; Placa E: espessuras de 1mm, 8mm e 15mm, 9 orifícios, diâmetros dos orifícios de 1mm



Fonte: do Autor, 2018

As simulações ocorreram da mesma forma como já explicitada no item 4.1.4. A escolha da placa seguiu o mesmo princípio para a determinação da pressão mais indicada para a ocorrência do fenômeno cavitacional. Quanto mais zonas de baixa pressão, mais intensas e maior taxa de recuperação, mais provável é o aumento da eficiência da cavitação.

4.3 ETAPA EXPERIMENTAL

4.3.1 Preparação das amostras

As amostras foram preparadas todas de uma vez em um tambor de 200L. A fim de garantir a sensibilidade dos testes de degradação foi definida a concentração inicial da solução de ácido húmico em 100ppm.

Antes da preparação da solução, o pH da amostra de 200L foi ajustado para 2,5, com o acréscimo gradual da solução de H₂SO₄ à 1M. Com o pH ajustado, a massa do sal de ácido húmico foi pesada em uma balança analítica e posteriormente, dissolvida na amostra de 200L.

Para cada experimento de degradação, a solução de 200L foi agitada durante 30 segundos. Foram retiradas amostras de 9L por teste. Antes de passar no aparato de cavitação, os 9L da solução foram filtrados com filtros de papel.

4.3.2 Tratamento cavitacional das amostras

Após a preparação das amostras de ácido húmico, os 9L filtrados foram despejados no reservatório do aparato, Figura 18. A pressão dos experimentos foi fixada em 730 kPa, como previsto em simulação.



Figura 18 – Aparato de cavitação em funcionamento

Fonte: do Autor, 2018

Foram utilizadas 5 placas para os ensaios de cavitação. As placas são ilustradas pela Figura 19. As placas foram usinadas no próprio laboratório com ajuda de uma mini retifica. Com exceção da última placa, que foi usinada por serviços terceiros. O material utilizado foi Tecnil.



Figura 19 – Placas utilizadas na câmara de cavitação

A última placa, quando aplicada a pressão dos ensaios não resistiu e rompeu (Figura 20).



Figura 20 – Placa de 3 espessuras com 9 furos rompida

Para substituí-la, foi usinada a mesma peça, porém desta vez com alumínio (Figura 21).



Figura 21 – Placa de 3 espessuras com 9 furos em alumínio

Para cada placa foram utilizadas 4 concentrações de peróxido de hidrogênio (30% w/v): 0ml, 1ml, 5ml e 10ml. Nos casos de aplicação de peróxido de hidrogênio, ele foi inserido antes do início dos experimentos. Para controle da temperatura durante os experimentos, utilizou-se água gelada no trocador de calor. Como dito anteriormente, as amostras foram coletadas a cada 3 minutos. A coleta foi feita com tubos Falcon de 50ml.

Ao fim dos experimentos, as amostras coletadas foram transferidas para balões de separação e ficaram em descanso por 24 horas antes dos testes de espectroscopia (Figura 22). O tempo de repouso foi adotado para que os sólidos suspensos sedimentassem.



Figura 22 - Amostra em repouso nos balões de separação

Fonte: do Autor, 2018

4.3.3 Testes de espectroscopia

Antes do início dos testes, foi criada uma curva de calibração, equação 17 para o maior comprimento de onda dentro da faixa espectroscópica do equipamento (Figura 20). Para a concentração de 100ppm utilizada nos experimentos, foi necessária a diluição de 1:4 para que absorção não ultrapassasse os limites do aparelho.

$$C = \frac{(ABS - 0.0038571429)}{0.0383705069} \tag{17}$$



Figura 23 - Variação da absorbância do ácido húmico em função do comprimento de onda

Observa-se na Figura 23, que o ponto de máxima absorbância foi próximo aos 210 nm. A partir desse comprimento de onda, criou-se a curva de calibração a partir de 5 diluições, Figura 24 (1,25mg/l; 2,5mg/l, 5mg/l; 10mg/l; e, 20mg/l), todas com o pH ajustado em 2,5, Figura 25. As concentrações adotadas para as 5 diluições foram para facilitar a regressão linear dos dados experimentais.

Figura 24 - Amostras das 5 diluições do ácido húmico para criação da curva de calibração



Fonte: do Autor, 2018

Fonte: do Autor, 2018



Figura 25 – Curva de calibração para a solução de ácido húmico à 100ppm de 1:4, para o comprimento de onda de 210 ppm e pH 2,5

Fonte: do Autor, 2018

5 **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

5.1 ETAPA COMPUTACIONAL

5.1.1 Teste de independência de malhas

O teste aplicado ao modelo monofásico serviu de base para o teste do modelo bifásico. A facilidade de simulação sem maiores problemas com divergências, fez com que as simulações para o teste partissem dele. Os resultados do modelo monofásico apontaram uma malha ideal para melhor representatividade do fenômeno. Os resultados do modelo bifásico apenas confirmaram a malha como a mais indicada por não realizar gastos computacionais desnecessários e por garantir a representatividade dos resultados.

Modelo monofásico

Na Figura 26 é apresentada a vazão média (média da vazão *inlet* e *outlet* do modelo) em função da densidade de malha gerada na geometria. A estabilização da densidade de malhas foi observada a partir de 1,100 elem/mm³. Para densidades superiores, independentemente da quantidade de elementos inseridos, os resultados possuíram valores similares e confirmaram a irrelevância do aprimoramento da malha.



Figura 26 – Vazões médias obtidas conforme a variação de densidade elementos



Na Figura 27 são observados os perfis de velocidade e de pressão no eixo Z do escoamento. Em ambas as figuras se observa discrepâncias entre os resultados correspondentes às densidades grosseiras e refinadas.





Fonte: do Autor, 2018

O comportamento dos parâmetros de velocidade e pressão foi verificado a partir de quatro densidades principais: 0,053 elem/mm³, 0,386 elem/mm³, 1,100 elem/mm³ e 2,311 elem/m³. A escolha das densidades foi conduzida na Figura 26. A malha 0,053 elem/mm³ corresponde a malha mais grosseira, a de 0,386 elem/mm³ ao ponto de maior distanciamento da faixa de estabilização, e as outras duas aos pontos de estabilização das vazões, um no início e outro ao final.

Discrepâncias entre os resultados das malhas grosseiras e refinadas puderam ser observadas. A densidade de 0,053 elem/mm³ foi a mais distante dos resultados obtidos pelas demais. A densidade 0,386 elem/mm³, apesar de ter se distanciado dos pontos mais refinados da Figura 26, ela se aproximou das malhas mais refinadas em relação aos perfis de velocidade e de pressão (Figura 27). Mas, como seus resultados foram destoantes na Figura 26, ela não pôde ser utilizada na validação do modelo. Entre as densidades de 1,100 elem/mm³ e 2,311 elem/mm³, escolheu-se a que possuiu a menor diferença entre os resultados com menor custo computacional, como previsto por Li et al. (2017). Desta forma, utilizou-se a densidade de 1,100 elem/mm³ na validação do modelo.

Modelo bifásico

Na Figura 28 são ilustradas as quatro curvas correspondentes as densidades de elementos escolhidas. Como para o modelo monofásico a melhor densidade foi a de 1,100 elem/mm³, ela serviu de referência para a escolha das outras. Foram escolhidas uma densidade mais grosseira (0,810 elem/mm³) e duas mais refinadas (3,130 elem/mm³ e 4,31 elem/mm³).

Observa-se na Figura 28 que a densidade de malha correspondente a 1,100 elem/mm³ se sobrepôs às malhas de 3,130 e 4,310 elem/mm³. Enquanto a malha de 0,810 elem/mm³ se distanciou das demais. Desta forma, também foi adotada a malha de 1,100 elem/mm³ para a representação das simulações bifásicas, assim como nas monofásicas.



Figura 28 - Perfil de pressão no eixo Z da câmara de cavitação para o modelo bifásico

Fonte: do Autor, 2018

5.1.2 Validação dos modelos

Os resultados apresentados (Figura 29) mostram que o erro relativo do modelo monofásico foi superior ao do modelo bifásico, para todos testes (Tabela 1). As simulações monofásicas apresentaram valores de erro relativo menores do que 10%, para os testes de 1 a 6, em que a pressão de entrada não foi suficiente para o completo desenvolvimento do fenômeno cavitacional.

A partir do teste 7, correspondente a pressão de entrada de 540 kPa, o erro relativo do modelo monofásico aproximou-se de 20% devido ao aumento e estabilização do volume de vapor. Observa-se também que o volume de vapor começou a ser produzido a partir do teste 4, 300 kPa, e manteve-se relativamente constante, próximo dos 35 mm³. O modelo bifásico, por sua vez, mesmo com o aumento do volume de vapor, permaneceu com percentual de erro relativo inferior a 10%.

Nos primeiros testes, as pressões de entrada não foram suficientes para o completo desenvolvimento do fenômeno cavitacional e o erro relativo do modelo bifásico chegou a quase 10% na primeira simulação. Quando o fenômeno se desenvolveu completamente, o erro não ultrapassou 5%.



Figura 29 - Erro relativo dos modelos bifásico e monofásico em relação a vazão e o volume de vapor produzido pelo aumento da pressão de entrada

Fonte: do Autor, 2018

A diferença entre os modelos mostrou a limitação das simulações monofásicas quando o fenômeno cavitacional está completamente desenvolvido (elevado volume de vapor). Os resultados do modelo monofásico foram divergentes aos apresentados pelo modelo bifásico e os dados experimentais. Por isso, descartou-se a hipótese de que o modelo monofásico poderia ser utilizado como uma ferramenta para auxiliar no entendimento do fenômeno cavitacional.

O modelo bifásico, por sua vez, forneceu resultados mais satisfatórios. O baixo erro relativo, para os testes com formação de volume de vapor, mostrou que o modelo *Mixture* é propício a reprodução dos resultados experimentais quando o fenômeno cavitacional está completamente desenvolvido. Tais observações estão de acordo com estudos computacionais encontrados na literatura (DHANDE e PANDE, 2016; CAI et al., 2014; ECHOUCHENE et al., 2011; MOHOLKAR e PANDIT, 2001).

5.1.3 Análise dos perfis de pressão

Na Figura 30 são mostrados os perfis de pressão das simulações bifásicas. Observa-se que os orifícios são preenchidos por zonas de baixa pressão, as quais se estendem para fora deles em diferentes intensidades, dependendo da pressão de entrada.

Os três primeiros perfis de pressão (50 kPa, 110 kPa e 230 kPa), como esperado pela não ocorrência do fenômeno cavitacional, não apresentaram coerência com relação ao comportamento hidráulico. Após o início da estricção a velocidade do escoamento tende a aumentar devido à redução da área. Em contrapartida, ao invés da pressão dentro do orifício ser menor do que a montante do escoamento, ela apresentou valores pressão elevada dentro da seção do orifício (Figura 31).

A partir da pressão de 300 kPa, o comportamento hidráulico quanto a pressão no orifício se torna mais coerente e a intensidade dos núcleos de baixa pressão tenderam a aumentar conforme o aumento de pressão de entrada (Figura 31). Vale destacar que o comportamento era esperado, já que na Figura 29 foi a partir dessa faixa de pressão que o volume de vapor começou a ser gerado e, consequentemente, o desenvolvimento do fenômeno cavitacional.

As pressões de entrada de 730 e 680 kPa foram as que apresentaram maior atividade cavitacional. Para essas pressões, as zonas de cavitação foram mais intensas, com uma área de baixa pressão maior a jusante da placa de orifício. As pressões de entrada entre 300 e 630 kPa também apresentaram elevada área de baixa pressão a jusante da placa, entretanto a intensidade foi inferior a pressão de 730 e 680 kPa.

Resultados similares foram obtidos em outros trabalhos. A zona de recuperação também se torna mais intensa conforme aumenta a carga de pressão de entrada (KULDEEP e SAHARAN, 2016; LI et al., 2017; BASHIR, 2011). Kuldeep e Saharan (2016) observaram em seus modelos que para pressões de 800 a 1000 kPa, as zonas de baixa pressão foram mais intensas e houve maior atividade cavitacional.



Figura 30 – Perfis de pressão das 10 simulações

Fonte: do Autor, 2018



Figura 31 - Comportamento da pressão dentro dos orifícios da placa de 15mm

Fonte: o Autor, 2018

5.1.4 Otimização das placas

A Figura 32 ilustra o perfil de pressão em função da espessura das placas. As placas foram nomeadas de acordo com a Figura 17. As placas A, B e C apresentaram zonas de baixa pressão mais intensas do que as placas D e E, o que indica uma área de cavitação maior a jusante da placa de orifício. Entretanto, as placas D e E apresentaram taxa de recuperação de pressão maior que as três primeiras. Com a taxa de recuperação elevada, a intensidade de implosão das microbolhas tende a aumentar (KUMAR, KUMAR e PANDIT, 2000).

Na Placa A ocorreu um comportamento inesperado. Dentro do orifício nota-se que a pressão relativa é mais elevada do que a pressão de saída. De modo a complementar, na Figura 33, pode-se observar que não houve redução da pressão a ponto de se tornar negativa. Essa divergência de resultado pode ser atribuída a erros intrínsecos ao modelo turbulento, ao modelo bifásico ou mesmo ao modelo numérico. É um erro pontual, que se localiza em um ponto crítico do escoamento. Um ponto em que há a mudança de fase e uma elevada aleatoriedade do

fenômeno cavitacional. E pelo orifício ter uma pequena extensão (1mm), o modelo não foi capaz de assimilar a mudança do fenômeno em um espaço reduzido e converteu o resultado em uma zona de "alta" pressão.

Nas Placas B e C pode-se perceber que houve a ocorrência do mesmo ponto de "alta" pressão dentro do orifício. Porém, como as outras duas placas possuíram uma extensão maior quanto ao orifício, o fenômeno se desenvolveu e a pressão se tornou negativa.

Figura 32 – Perfis de pressão nas placas A, B, C, D e E. As linhas tracejadas em vermelho indicam a distância média de recuperação para os dois diferentes grupos de placas.



Fonte: do Autor, 2018

A Placa D apresentou uma zona de baixa pressão similar as três placas iniciais, porém, pela maior quantidade de orifícios, houve formação de mais zonas de baixa pressão. De menores intensidades, porém mais numerosas. O que já era esperado, já que o número elevado de

orifícios tinha o objetivo de distribuir o volume de vapor de maneira mais uniforme pela seção transversal da placa.

Na Placa E, por mais que a distribuição dos orifícios foi em diferentes espessuras (1mm, 8mm e 15mm), a zona de baixa pressão não se estendeu além das outras placas (A, B e C).

Como as placas se dividiram em dois grupos, a comparação entre eles representa dois pontos de vista diferentes. O primeiro grupo (placas A, B e C), por possuir um único orifício, apresentou uma zona de baixa pressão mais intensa e de maior extensão. Entretanto, com uma recuperação da zona de baixa pressão mais gradual. O segundo grupo (placas D e E), por possuir 9 orifícios para a distribuição do escoamento, apresentou zonas de baixa pressão menos intensas, mas com elevada recuperação de pressão e uma melhor distribuição de zonas de baixa pressão.



Figura 33 - Comportamento da pressão nas placas A, B, C, D e E

Ambos os grupos possuem prós e contras. O grupo das placas A, B e C tem a vantagem de apresentarem maior intensidade de zona propicia a cavitação e maior probabilidade de

Fonte: do Autor, 2018

ocorrência de vapor (GOGATE e PANDIT, 2001). Em contrapartida, essa maior intensidade da zona de baixa pressão, juntamente com a menor taxa de recuperação de pressão pode propiciar a interação bolha-bolha, ou também conhecida como nuvem de bolhas. Conhecida na literatura por reduzir o potencial de implosão do fenômeno (PAWAR et al., 2017; ARROJO, BENITO E TARIFA, 2007; MEZULE et al., 2009; BASHIR et al., 2011; SAHARAN, 2016).

O grupo das placas D e E, por sua vez, possuem a vantagem de possuir baixa probabilidade de ocorrência da interação entre as microbolhas e elevada taxa de recuperação de pressão. Fatores que indicam maiores chances para o desenvolvimento completo do fenômeno cavitacional, formação, crescimento e implosão. Por outro lado, o fato de não possui grande intensidade na zona de baixa pressão após o orifício, pode acarretar em baixo acumulo de energia para o momento da implosão (MOHOLKAR, V. S., PANDIT, 2001). Ou seja, existem grandes probabilidades da ocorrência do fenômeno, porém pode ser que não seja muito efetivo por falta de energia (ARROJO, BENITO E TARIFA, 2007).

5.2 ETAPA EXPERIMENTAL

Os ensaios de degradação apresentaram resultados que possibilitaram observar quais parâmetros foram mais influentes para remoção de cor de uma solução de ácido húmico. Entretanto é valido apresentar alguns resultados que não eram esperados, mas que podem contribuir para pesquisas futuras.

5.2.1 Tratamento cavitacional das amostras

Após a etapa de descanso de 24 horas das amostras (Figura 34), foram observados dois principais comportamentos. Sem tratamento, as amostras não apresentaram corpo de fundo. Amostras com 3 minutos ou mais de tratamento apresentaram corpo de fundo, e de forma aleatória, tiveram afinidade com a parede do balão de separação (Figura 35).

O termo aleatoriedade foi utilizado pelo fato da afinidade com a parede ocorrer tanto em amostras sem peróxido, quanto para amostras com 1ml, 5ml e 10ml, independentemente do tempo de exposição ao tratamento cavitacional.

As amostras não foram filtradas novamente, pois mesmo que tenha sido formado um corpo de fundo nas amostras, qualquer agitação, por mínima que fosse, o corpo de fundo voltava a se dissolver. Desta forma, foi utilizada a metodologia de retirar 25ml das amostras contidas no balão de separação e realizar os testes de espectroscopia com os 25 ml restantes.
Figura 34 – Amostras com 1ml de peróxido após 24 horas de repouso. À direita amostra com sem tratamento. À esquerda amostra com 3 minutos de tratamento.



Fonte: do Autor, 2018

Figura 35 – Comportamento do corpo de fundo após as 24 horas de repouso. À esquerda, sedimentação total do corpo de fundo. À direita, afinidade com a parede do balão de separação



Fonte: do Autor, 2018

Os resultados dos testes de espectro apresentaram alguns pontos de concentração elevada, como será discutido no item 5.2.2. Eles estão diretamente relacionados com as amostras que apresentaram afinidade de parede. Mesmo com a retirada de 25ml da amostra com o corpo de fundo, em algumas amostras ainda houve a presença dos corpos de fundo que ficaram presos à parede do balão (ZHANG, WU e LI, 2012). O corpo de fundo restante fez com que quando fosse retirada a parte final dos 25ml da amostra, elas voltassem a se misturar e agregar cor (Figura 36).

Figura 36 - Exemplos de amostras que sofreram efeito de parede



Fonte: do Autor, 2018

5.2.2 Testes de espectroscopia

Os resultados obtidos com o teste de espectroscopia para os experimentos sem peróxido são apresentados na Figura 37. O destaque para a remoção de cor foi a placa E. A eficiência da placa chegou aos 49,5% aos 6 minutos de tratamento, enquanto as demais placas não atingiram o valor ao final dos 15 minutos. A placa, que apresentou um pouco mais de eficiência além da placa E, foi a placa D, com 42,9% ao final dos 15 minutos.

As placas A, B e C apresentaram comportamento similar entre si. Mesmo com o aumento do tempo de exposição ao tratamento, eficiência entre elas não sofreu grandes variações. Até os 15 minutos de experimento, a máxima eficiência obtida foi próxima aos 20%. Nenhuma delas conseguiu atingir a eficiência de 40%, ao fim do tratamento.

A placa E, ao final dos 15 minutos, obteve valores próximos aos 70% de eficiência, sem a adição de nenhum agente oxidante. Os resultados foram expressivos, dado que na literatura, grande parte dos tratamentos cavitacionais, sem a adição de oxidantes para degradação de substâncias, possui eficiência abaixo de 50% (LI et al., 2017; RAJORIYA, BARGOLE e SAHARAN, 2017; KUMAR, SONAWANE e PANDIT, 2017).

Pode-se observar que houve picos significativos de aumento e redução de eficiência para a placa D. A ocorrência dos picos já foi citada no item 5.2.1. A placa D foi a que possuiu maior efeito de parede nas amostras (Figura 35). Nota-se a influência do mesmo, porém mais discretamente, na placa A, aos 6 e 9 minutos e na placa B, aos 9 minutos.



Figura 37 – Eficiência de remoção de cor para as 5 placas sem o uso de peróxido

Fonte: do Autor, 2018

Na Figura 38 são ilustradas as curvas de eficiência de remoção de cor com a aplicação de 1ml de peróxido. Em comparação com os resultados obtidos com o tratamento sem o uso do oxidante (Figura 37), a remoção de cor foi mais eficiente. Com apenas 3 minutos de tratamento,

todas as placas atingiram eficiências acima de 55%. Ao fim dos 15 minutos, todas as eficiências superaram os 70%. Com destaque para as placas A, que chegou próximo dos 90% de remoção de cor.

A placa E, que anteriormente obteve quase 70% de remoção sem uso de oxidante, não apresentou significativo aumento de eficiência. Apresentou apenas uma antecipação na eficiência máxima de tratamento. Aos 3 minutos de tratamento com o uso de 1 ml de peróxido obteve 71% de remoção, enquanto sem peróxido, aos 3 minutos, havia removido 25,5% da cor.



Figura 38 - Eficiência de remoção de cor para as 5 placas com 1 ml de peróxido

Na Figura 39 é apresentado o resultado da aplicação de 5ml de peróxido. O efeito de oxidante começa a reduzir a eficiência do tratamento. Enquanto para 1 ml todas as placas atingiram 70% de eficiência, com 5ml as placas B e E não ultrapassaram esse valor. Com destaque para a placa E que teve sua eficiência reduzida em todos os tempos de tratamento. É valido citar que houve interferência do efeito de parede em suas amostras. Mas também, sua eficiência reduziu em comparação com o tratamento anterior.

As placas A e B continuaram como as placas que tiveram maior eficiência de tratamento, juntamente com a placa C, que mesmo com a interferência do efeito de parede do corpo de fundo no tempo de 9 minutos, apresentou uma eficiência média alta nos outros tempos.

Fonte: do Autor, 2018

A placa D, que nos outros tratamentos, havia sofrido variações de eficiência pelo efeito de parede, nesse tratamento foi a que menos apresentou comportamento de aumento e declínio remoção de cor.



Figura 39– Eficiência de remoção de cor para as 5 placas com 5 ml de peróxido

Fonte: do Autor, 2018

A aplicação dos 10 ml de peróxido foi a que apresentou os piores resultados quanto as variações de remoção de cor das amostras (Figura 40). A única placa que apresentou comportamento com menos oscilações na remoção de cor foi a Placa A. As demais placas apresentaram variações, principalmente as placas C e E, que claramente tiveram as eficiências reduzidas pela afinidade do corpo de fundo com as paredes do balão de separação.

A placa B, mesmo com eficiência acima de 60% logo aos 3 minutos de tratamento, teve sua remoção de cor reduzida nas amostras de 12 e 15 minutos de tratamento.

Com a análise das Figura 37, 38, 39 e 40 nota-se que cada grupo de placas citadas no item anterior possui uma afinidade para o uso do peróxido. Para o primeiro grupo (placa A, B e C), principalmente para a placa A, a eficiência na remoção de cor foi significativa (acima de 80% ao final dos 15 minutos de tratamento) com o uso do oxidante, independente do volume utilizado (Figura 41).

O segundo grupo de placas (placa D e E), principalmente a placa E, apresentou maior eficiência na ausência do peróxido. Na Figura 37 foi possível observar uma eficiência de quase 70% na remoção de cor, sem a adição de nenhum mililitro de oxidante. Em compensação,

quando o oxidante começou a ser aplicado, sua eficiência foi reduzindo conforme o aumento do volume utilizado (Figura 41).



Figura 40- Eficiência de remoção de cor para as 5 placas com 10 ml de peróxido

Fonte: do Autor, 2018

Figura 41 – Eficiência de remoção de cor com uso da placa A e E para os volumes de 0ml, 1ml, 5ml e 10ml de peróxido



Fonte: do Autor, 2018

Segundo o previsto por Zhang et al. (2012), a redução da concentração de ácido húmico ocorreu por duas principais vias: a degradação por oxidação e por coagulação. A oxidação está relacionada aos radicais formados pela dissociação da molécula da água e da molécula do peróxido de hidrogênio; e, a coagulação está relacionada as cargas que as moléculas do ácido húmico incorporaram durante o fenômeno cavitacional. O fenômeno carrega as moléculas de forma com que para elas se neutralizem seja necessário elas se aglutinarem.

Independente da placa observada e do tempo de tratamento, o uso de 1 ml de peróxido foi o que apresentou melhores resultados de remoção de cor. Para a concentração de 100 ppm de ácido húmico tratado o ponto de ótimo de aplicação de oxidante é 1 ml a cada 9 L de efluente.

5.3 OTIMIZAÇÃO DAS CÂMARAS DE CAVITAÇÃO A PARTIR DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS E COMPUTACIONAIS

Como concluído anteriormente, pelos perfis de pressão e remoção de cor, foi possível observar dois grupos diferentes de placas. As placas A, B e C, que possuem apenas um furo de 3 mm de diâmetro, mas com variação de espessura entre si; e, as placas D e E que apresentaram 9 furos (1 mm de diâmetro), uma com espessura fixa (1 mm) e outra com 3 perfis diferentes de espessura (1 mm, 8 mm e 15 mm), respectivamente.

Cada grupo de placas apresentou características distintas tanto nos resultados dos perfis de pressão (Figura 32) quanto na eficiência de remoção de cor (Figura 37, 38, 39 e 40). Os perfis de pressão com taxa de recuperação mais lenta, porém com maior intensidade de zona de baixa pressão obtiveram resultados significativos de remoção de cor quando houve a aplicação do oxidante. Enquanto as placas, que apresentaram taxa de recuperação mais rápida e zonas de baixa pressão mais distribuídas e de menores intensidades, tiveram melhores eficiências na remoção de cor sem o uso do peróxido e com 1 ml de peróxido. Altas quantidades de oxidante obtiveram efeito inverso para todas as placas.

Diante disso pode-se afirmar que quanto maior o número de zonas de baixa pressão geradas pelas câmaras de cavitação e mais rápida sua taxa de recuperação, menor a necessidade do uso de oxidantes.

Enquanto para as câmaras que propiciam uma recuperação de pressão mais lenta com poucas, mas intensas zonas de baixa pressão, a eficiência foi maior com o uso do oxidante. Porém, não desqualifica a afirmação que existe um ponto ótimo de aplicação de oxidante. No caso desse estudo foi 1 ml, independente da placa.

Outro resultado que pode ser discutido é a relação de radicais hidroxila em ambos os grupos de placas. Os resultados das placas que possuem 9 furos indicam que foram capazes de

gerar mais radicais sem a necessidade de um oxidante. A geração dos radicais hidroxila está diretamente ligado ao desenvolvimento do fenômeno cavitacional. A distribuição das zonas de baixa pressão dificultou a interação entre as microbolhas e facilitou de implosão. Enquanto para as placas de apenas um orifício foi necessário a aplicação de um oxidante para potencializar e compensar as perdas causadas pela interação das microbolhas e a redução do potencial de implosão.

Entretanto quando houve um aumento excessivo da quantidade de peróxido (5 ml e 10 ml), ocorreu o previsto por Raut-Jadhav et al. (2016), Bagal e Gogate (2013) e Patil, Bote e Gogate (2014). A adição excessiva provoca a formação de radicais com potencial de oxidação menor do que o do radical hidroxil, resultado de uma reação secundária do próprio radical hidroxila, já apresentado pela equação 6. Tanto que, para todas as placas, independente da eficiência sem e com o peróxido, para os volumes de 5 e 10 ml do oxidante, a eficiência de remoção de cor reduziu.

6 CONCLUSÃO

A partir dos resultados obtidos, algumas conclusões sobre o estudo puderam ser listadas, conforme segue.

 O teste de independência de malhas forneceu um número de elementos ideal em função do volume da peça de 1.1 elem/mm³. O valor serviu de base para a escolha do número de elementos para as simulações monofásicas e como ponto de partida para o refinamento do modelo bifásico;

• O modelo monofásico apresentou confiabilidade em seus resultados apenas para baixas faixas de vazão (ou elevado número de cavitação), nas quais o fenômeno cavitacional não foi completamente desenvolvido. O erro relativo entre os resultados experimentais e computacionais para baixas faixas de pressão não ultrapassou 7,5%. Porém, quando o fenômeno cavitacional teve início, o erro relativo passou a aumentar conforme a vazão do escoamento aumentava. O erro relativo nesses casos chegou próximo aos 20%;

• No modelo bifásico, independente da pressão de entrada, o erro relativo entre as vazões experimentais e computacionais não ultrapassaram 10%;

• Pressões abaixo de 300 kPa não apresentaram perfis de pressão coerentes;

 As pressões de entrada de 730 e 680 kPa apresentaram maior atividade cavitacional, em comparação as demais pressões;

• Entre as placas utilizadas para a otimização da câmara, observou-se dois perfis de cavitação. Um grupo de placas (A, B e C) apresentou a taxa de recuperação de pressão menor, menor número de zonas de baixa pressão e elevada intensidade. Outro grupo de placas (D e E) com elevada taxa de recuperação de pressão, zonas de baixa pressão mais bem distribuídas, porém com intensidade reduzida;

• A remoção de cor da solução de ácido húmico possuiu dois principais resultados. Para o tratamento sem o uso de agentes oxidantes, a placa com maior eficiência de remoção de cor foi a placa E (próxima aos 70%). Enquanto com o uso de oxidante, a placa A foi a que apresentou melhores resultados, com aproximadamente 90% de eficiência;

• O tratamento com o uso do oxidante apresentou um ponto ótimo de 1 ml para cada 9 L de solução de ácido húmico. Independente da placa utilizada, o peróxido acelerou o processo de remoção de cor e com 3 minutos de tratamento, todas as amostras apresentaram eficiência acima dos 55%;

• Amostras com mais de 5ml de peróxido tiveram sua eficiência de remoção de cor reduzida.

• Recomenda-se que em trabalhos futuro sejam realizadas, com forma de complementação de resultados, análises da demanda química de oxigênio (DQO) e de carbono orgânico total (COT). É importante verificar a capacidade de remoção de matéria orgânica também pela mineralização do carbono existente na solução de ácido húmico, além da quantificação da remoção de cor pelo teste de espectroscopia.

REFERÊNCIAS

1. ANSYS FLUENT Theory Guide, ANSYS Inc., Canonsburg, USA, 2011.

2. ARROJO, S., BENITO, Y. A theoretical study of hydrodynamic cavitation. **Ultrasonics Sonochemistry**. Madri, v. 15, p. 203-211, 02 de abril de 2007.

3. BAGAL, M.V., GOGATE P.R., Degradation of 2,4-dinitrophenol using a combination of hydrodynamic cavitation, chemical and advanced oxidation processes, **Ultrason. Sonochem**. v. 20, p. 1226–1235, 2013.

4. BASHIR, T. A., SONI, A. G., MAHULKAR, A. V., PANDIT, A. B. The CFD driven optimisation of a modified venturi for cavitational activity. **The Canadian Journal of Chemical Engineering.** Canadá, v. 89, p. 1366 – 1375, dezembro de 2011;

5. BATISTA, M. D., ANHÊ, A. C. B. M., GONÇALVES, J. C. S. I. Use of hydrodynamic cavitation for algae removal: effect on the inactivation of microalgae belonging to genus *scenedesmus*. **Water Air Soil Pollut**. (2017) 228:443.

6. BHANDARI, V. M., SOROKHAIBAM, L. G., RANADE, V. V. Industrial wastewater treatment for fertilizer industry: a case study. **Desalination and Water Treatment**. Lincoln, v. 1, p. 1-11. 09 de julho de 2016.

7. BOKHARI, A., YUSUP, S., CHUAH, L. F., KLEMES, J. J., ASIF, S., ALI, B., AKBAR, M M., KAMIL, R. N. M. Pilot scale intensification of rubber seed (Havea brasiliensis) oil via chemical interesterisfication using hydrodynamic cavitation technology. **Bioresorce Technology.** Oxford, v. 242, p. 272-282. 2017.

8. BRASIL. Portaria nº 518, de 24 de março de 2004. Brasília, DF, Disponível em: http://bvsms.saude.gov.br/bvs/publicacoes/portaria_518_2004.pdf>. Acesso em: 09 jul. 2018.

9. _____. Sistema Nacional de Informações sobre Saneamento - **SNIS**. Brasília, DF, Disponível em: < http://app3.cidades.gov.br/serieHistorica/#>. Acesso em: 09 jul. 2018.

10. CAI, J., LI, X., LIU, B., HUAI, X.. Effect of cavitating flow on forced convective heat transfer: a modeling study. **Chinese Science Bulletin**. China, v. 59, p. 1580-1590. 2014.

11. CAPOCELLI, M., PRISCIANDARO, M., LANCIA, A., MUSMARRA, D. Hydrodynamic cavitation of p-nitrophenol: A theoretical and experimental insight. **Chemical Engineering Journal**. Roma, v. 254, p. 1-8. 22 de maio de 2014.

12. CARON, V. C., GRAÇAS, P. J., CASTRO, P. R. C.. **Condicionadores do solo:** ácidos húmicos e fúlvicos . Universidade de São Paulo, ESALQ. Série produtor rural, nº 58. 49p., Piracicaba, 2015. 13. CARPENTER, J., GEORGE, S., SAHARAN, V. K.. Low pressure hydrodynamic cavitating device for producing highly stable oil in water emulsion: Effect of geometry and cavitation number. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**. Suíça, v. 116, p. 97-104. 2017.

14. CONCLI, F.. Pressure distribution in small hydrodynamic journal bearings considering cavitation: a numerical approach based on the open-source CFD code OpenFOAM. **Lubrication Science**. Inglaterra. 2016.

15. DHANDE, D. Y., PANDE, D. W.. Multiphase flow analysis of hydrodynamic journal bearing using CFD coupled Fluid Structure Interaction considering cavitation. **Journal of Kind Saud University – Engineering Sciences**, p. 1-10. 2016.

16. ECHOUCHENE, F., BELMABROUK, H., L. L., BUFFAT, M.. Numerical simulation of wall roughness effects in cavitation flow. **International Journal of Heat and Fluid Flow**. Nova Iorque, v. 32, p. 1068-1075. 2011.

17. GAGOL M., PRZYJAZNY A., BOCZKAJ G., Waste treatment by means of advanced oxidation process based on cavitation – A review. **Chemical Engineering Journal.** v. 338, p. 599 – 627. 2018.

18. GHAYAL, D., PANDIT, A. B., RATHOD, V. K. Optimization of biodiesel production in a hydrodynamic cavitation reactor using used frying oil. **Ultrasonics Sonochemistry**. Mumbai, India, v. 20, p. 322-328, 2013.

19. GIATTI, L. L., CUTOLO, S. A.. Acesso à água para consume humano e aspectos de saúde pública na Amazônia Legal. **Ambiente e Sociedade.** São Paulo, v. 15, p. 93-109, 2012.

20. GOGATE, P. R. Application of cavitational reactions for water disinfection: current status and path forward. **Journal of Environmental Management.** Mumbai, India, v. 85, p. 801-815. 4 de julho de 2007.

21. _____. Cavitation: an auxiliary technique in wastewater treatment shemes. **Enviromental Research**. Mumbai, India, v. 6, p. 335-358, 2002.

22. GOGATE, P. R., TAYAL, R. K., PANDIT, A. B., Cavitation: a technology on the horizon. **Current Science.** v. 91, n. 1, p.35-46, 2006.

23. GOGATE, P.R., PANDIT, A. B., Hydrodynamic cavitation: A State of the Art Review. **Chemical Engineering**. Mumbai, India, v. 17, p. 1-85, 2001.

24. JYOTI, K.K., PANDIT, A.B. Effect of cavitation on chemical disinfection efficiency, **Water Resource**. v.38, p. 2249–2258. 2004.

25. HILARES, R. T., ALMEIDA, G. F., AHMED, M. A., ANTUNES, F. A. F., da SILVA, S. S., HAN, J., dos SANTOS, J. C.. Hydrodynamic cavitation as an efficient pretreatment method for lignocellulosic biomass: A parametric study. **Bioresource Technology**. Reino Unido, v. 235, p. 301-308. 2017.

26. HU, C. L., WANG, G. Y., WANG, Z. Y. Partially Averaged Navier-Stokes method based on $k-\omega$ model for simulating unsteady cavitating flows. International Symposium of Cavitation and Multiphase Flow. China, v. 72, 2014.

27. HUANG, Y., WU, Y., HUANG, W., YANG, F., XIAN e REN. Degradation of chitosan by hydrodynamic cavitation. **Polymer Degradation and Stability**. Inglaterra, v. 98, p. 37-43. 2013.

28. JANGIR, N., DIWEDI, P., GHOSH, S. Design of a hydrodynamic cavitating reactor. **Chemical Engineering & Processing: Process Intensification.** v. 122. p. 128-142. 2017.

29. JYOTI, K. K., PANDIT A.B. Water disinfection by acoustic and hydrodynamic cavitation. **Biochemical Engineering Journal**, v. 7, p. 201-212. 2001.

30. KULDEEP, SAHARAN, V. K. Computational study of different venturi and orifice type hydrodynamic cavitating devices. **Journal of Hydrodynamics.** v. 28, p. 293-305. 2016.

31. KUMAR M. S., SONAWANE, S. H., PANDIT, A. B. Degradation of methylene blue dye in aqueous using hydrodynamic cavitation based hybrid advanced oxidation process. **Chemical Engineering & Processing: Process Intensification.** v. 122, p. 288 – 295. 2017.

32. KUMAR P. S., PANDIT, A. B. Modeling hydrodynamic cavitation. **Chemical Engineering Technology.** v. 22, p. 1017 – 1027. 1999.

33. KUMAR, P. S., KUMAR M. S., PANDIT, A. B., Experimental quantification of chemical effects of hydrodynamic cavitation. **Chemical Engineering Science.** Oxford, v. 55, p. 1633 – 1639. 2000.

34. KUMMITHA, O. R.. Numerical analysis of hydrogen fuel scramjet combustor with turbulence development inserts and with different turbulence models. **International Journal of Hydrogen Energy**. Oxford, v. 42, p. 6360-6368. 2017;

35. LAM, W. H., ROBINSON, D. J., HAMILL, G. A., JOHNSTON, H.T.. An effective method for comparing the turbulence intensity from LDA measurements and CFD predictions within a ship propeller jet. **Ocean Engineering**. Inglaterra, v. 52, p. 105-124 .2012.

36. LI, X., HUANG, B., CHEN, T., LIU, Y., QIU, S., ZHAO, J. Combined experimental and computational investigation of the cavitating flow in an orifice plate with special emphasis on surrogate-based optimization method. **Journal of Mechanical Science and Technology.** China, v. 31, p. 269 – 279, 2017.

37. LIDTKE, A. K., HUMPHREY, V. F., TURNOK, S. R.. Feasibility study into a computational approach for marine propeller noise and cavitation modelling. **Ocean Engineering**. Inglaterra, v. 120, p. 152-159. 2016.

38. MANCUSO, G., LANGONE, M., ANDREOTTOLA, G. A swirling jet-induced cavitation to increase activated sludge solubilization and aerobic sludge bidegradability. **Ultrasonics Sonochemistry**. Inglaterra, v. 35, p. 498-501. 2017.

39. MEZULE, L., TSYFANSKY, S., YAKUSHEVICH, V., JUHNA, T..A simple technique for water disinfection with hydrodynamic cavitation: Effect on survival of *Escherichia coli*. **Desalination**. Irlanda, v. 248, p. 152-159. 2009.

40. MOHOLKAR, V. S., PANDIT, A. B., Modeling of hydrodynamic cavitation reactors: a unified approach. **Chemical Engineering Science.** Oxford, v. 56, p. 6295-6302, 2001.

41. MONTUSIEWICZ, A., PASIECZNA-PATKOWSKA, S., LEBIOCKA, M., SZAJA, A., SZYMANSKA-CHARGOT, M. Hydrodynamic cavitation of brewery spent grain diluted by wastewater. **Chemical Engineering Journal**. Nova Zelândia, v. 313, p. 946-956. 2017.

42. NADA, S. A., FOUDA, A., ELATTAR, H. F.. Parametric study of flow field and mixing characteristics of outwardly injected jets into a crossflow in a cylindrical chamber. **International Journal of Thermal Sciences**. Paris, v. 102, p. 185-201. 2016.

43. OLIVEIRA. L. C.. **Substâncias húmicas aquáticas do Rio Negro-AM:** Influência da sazonalidade nas características estruturais, distribuição de carbon e capacidade de complexação por íons Hg(II) em função do tamanho molecular. 2007. 98p. Tese (Doutorado em Química). Universidade Estadual Paulista, Araraquara, 2007.

44. PARSA, J.B., ZONOUZIAN, S.A.E..Optimization of a heterogeneous catalytic hydrodynamic cavitation reactor performance in decolorization of Rhodamine B: application of scrap iron sheets. **Ultrason. Sonochem**. v. 20. p. 1442–1449. 2013.

45. PATIL, P.N., BOTE, S.D., GOGATE, P.R., Degradation of imidacloprid using combined advanced oxidation processes based on hydrodynamic cavitation, **Ultrason. Sonochem**. v.21, p. 1770–1777, 2014.

46. PATIL, P.N., GOGATE, P.R., Degradation of methyl parathion using hydrodynamic cavitation: Effect of operating parameters and intensification using additives, **Sep. Purif. Technol.** v. 95 p.172–179, 2012;

47. PAWAR, S. K., MAHULKAR, A. V., PANDIT, A. B. Sonochemical effect induced by hydrodynamic cavitation: comparison of venturi/orifice flow geometries. **AIChE Journal** v. 63, n. 10. 2017.

48. PORTO, R. de M.. Sistemas Elevatórios – Cavitação. In: PORTO, R. M.. **Hidráulica Básica.** 4ª edição. São Carlos. EESC-USP, 2006. p. 154.

49. RAJORIYA, S., BARGOLE, S., SAHARAN, V. K., Degradation of reative blue 13 using hydrodynamic cavitation: Effect of geometrical parameters and different oxidizing additives. **Ultrasonics Sonochemistry.** Inglaterra, v. 37, p. 192-202. 2017.

50. RAUT-JADHAV, S., BADVE, M. P., PINJARI, D. V., SAINI, D. R., SONAWANE, S. H., PANDIT, A. B.. Treatment of the pesticide industry effluent using hydrodynamic cavitation and its combination with process intensifying additives (H₂O₂ and ozone). **Chemical Engineering Journal**. Inglaterra, v. 112, p. 4505-4514. 2016.

51. ROCHA, J. C.; ROSA, A. H. **Substâncias húmicas aquáticas:** interação com espécies metálicas. São Paulo: Editora UNESP, 2003. 138 p.

52. SAVE, S. S., PANDIT, A. B., JOSHI, J. B.. Use of hydrodynamic cavitation for large scale microbial cell disruption. **Institution of Chemical Engineers.** Índia, v. 75, p. 41-49. 1997.

53. SCHNERR, GH, SAUER, J. Physical and Numerical Modeling of Unsteady Cavitation Dynamics. **4th International Conference on Multiphase Flow**, New Orleans, USA, 2001.

54. SCHULTEN, H. R.; SCHNITZER, M. Three dimensional models for humic acids and soil organic matter. **Naturwissenschaften**, v. 82, n. 2, p. 487-498, 1995.

55. SONG, Y.L., LI J.T., Degradation of C.I. Direct Black 168 from aqueous solution by fly ash/H2O2 combining ultrasound, **Ultrason. Sonochem**. v. 16 p. 440–444. 2009.

56. TAO, Y., CAI, J., HUAI, X., LIU, B., GUO, Z. Application of Hydrodynamic Cavitation to Wastewater Treatment. **Chemical Engineering & Technology Journal**. Alemanha, v. 39, p. 1363-1376. 13 de abril de 2016.

57. WERSHAW, R. L. Model for humus in soils and sediments. **Enviromental Science and Technology**, v. 27, n. 2, p. 814-816, 1993.

58. WU, Z.L. ONDRUSCHKA, B., BRÄUTIGAM, P. Degradation of chlorocarbons driven by hydrodynamic cavitation. **Chemical Engineering Technology**. v. 30, p. 642–648. 2007.

59. ZHANG, H., WU, X., LI, X.. Oxidation and coagulation removal of COD from landfill leachate by Fered-Fenton process.**Chemical Engineering Journal.** v. 210, p. 188-194. 2012.

60. ZEIDEMANN, V.K. **O Rio das Águas Negras**. In: Oliveira, A.A.; D.C. Daly; D. Varella. (Org.). Florestas do Rio Negro. 1ed.Sao Paulo: Companhia das Letras, 2001, v. 61, p. 87-339.

| Colline ▼ Solition The Solition The Solition S | | | |
|---|--|-----------------------------|-----------|
| Ortal | | | |
| Styles Participese 050 Saver Partnerss Participese | | | |
| Server | | | |
| Relevance Creter Disk remote the research of t | | | |
| Secondary Have | | | |
| Seen Angle Center Fine Curvidiant Newald Angle Default (18.01) | | | |
| Prosinity Assurage 0,5 Num Cells Amore Cap Default (8) | | | |
| Min Size Default (7:50%-002 min) Proximity Min Size Default (7:50%+002 min) | | | |
| Man Fort Star 7,0 mm Max Star 14,80 mm | a state of the sta | | |
| Analis Tale 1,000 Minimum Edge Longth 9,42461 mm | | 6 m 100.00 238.00 (nm) | |
| Assembly Mediling Patch (contraming disting) | | sam tiam | |
| Advanced Astronomy Agents | Details of "Mesh" | + - | |
| Statistic Controls Controls | Defaults | | |
| Denerts 125/172 Nath Nate: Orthogenal Quality | Physics Preference | CFD | |
| Min 0,090056251901 Max 0,9679500391106 | Solver Preference | Fluent | |
| Arcitege 0.06/02/1782/440996 400000000000000000000000000000000 | Relevance | 0 | |
| 1 2 20000,00 | | • | |
| Sector Plance + x | | | 0,90 |
| • /c | Use Advanced Size Function | On: Proximity and Curvature | |
| Pass Find Help | Relevance Center | Fine | dis Celau |
| | Initial Size Seed | Full Assembly | |
| | Smoothing | High | |
| \backslash | Transition | Slow | |
| \backslash | Span Angle Center | Fine | |
| | Curvature Normal Angle | Default (18.0 %) | |
| \backslash | | | |
| \backslash | Proximity Accuracy | 0,5 | |
| \backslash | Num Cells Across Gap | Default (3) | |
| \backslash | Min Size | Default (7,1501e-002 mm) | |
| \ | Proximity Min Size | Default (7,1501e-002 mm) | |
| | Max Face Size | 7,0 mm | |
| \ | Max Size | 14,30 mm | |
| \backslash | Growth Rate | 1.020 | |
| \ | Minimum Edge Length | 9.42480 mm | |
| \ | | 5/12100 mm | |
| \ | Accombly Machine | | |
| | + Assembly Meshing | | |
| \ | Patch Conforming Options | | |
| \ | + Advanced | | |
| | Defeaturing | | |
| \backslash | Statistics | | |
| \ | Nodes | 218915 | |
| \ | Elements | 1251172 | |
| \ | Mesh Metric | Orthogonal Quality | |
| \ | Min | 0.220205552257001 | |
| \ | WIN | 0,253203502257901 | |
| \ | Max | 0,997193083935764 | |
| \ | Average | 0,867027782440994 | |
| | Standard Deviation | 8,28313973928272E-02 | |
| | | | |

APÊNDICE A – INTERFACE DO MESH DESIGNER