MÔNICA FEIJÓ NACCACHE

ESTUDO DA DEPOSIÇÃO TERMOFORÉTICA DE PARTÍCULAS
NA FABRICAÇÃO DE FIBRAS ÓTICAS

TESE DE MESTRADO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

RIO DE JANEIRO, 27 DE JUNHO DE 1989

MÔNICA FEIJÓ NACCACHE

**ESTUDO DA DEPOSIÇÃO TERMOFORÉTICA
DE PARTÍCULAS NA FABRICAÇÃO DE FIBRAS ÓTICAS**

Dissertação apresentada ao Departamento de Engenharia Mecânica da PUC/RJ como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Prof. Paulo Roberto de Souza Mendes

Prof. Luis Fernando Alzuguir de Azevedo

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO RIO DE JANEIRO

Rio de Janeiro, 27 de junho de 1989

A meus pais

AGRADECIMENTOS

Aos professores Paulo Roberto de Souza Mendes e Luís Fernando Alzuguir Azevedo, pelo seu apoio, estímulo e orientação durante todo o curso de mestrado e durante todo este trabalho.

Ao professor José Alberto dos Reis Parise, pelo seu apoio e incentivo durante todo o curso de mestrado.

À professora Angela Ourivio Nieckele pelas importantes contribuições no decorrer deste trabalho.

À Beth, pelos desenhos.

A todos os meus colegas que de alguma forma contribuíram com este trabalho.

Ao CNPq, pelo suporte financeiro durante todo o curso de mestrado.

À FAPERJ, pelo apoio financeiro durante este trabalho.

RESUMO

O presente trabalho é uma simulação numérica do processo de deposição de partículas num escoamento laminar no interior de um tubo submetido a um aquecimento externo. A simulação tem como objetivo a modelagem do processo MCVD (Deposição Modificada de Vapor Químico), utilizado na fabricação de pré-formas para a produção de fibras óticas. Neste processo, as partículas carregadas por convecção pelo gás são depositadas na parede interna do tubo devido à força termoforética. A eficiência de deposição é obtida resolvendo-se numericamente as equações diferenciais de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia e espécies químicas (massa de partículas). A última equação foi resolvida utilizando o campo de velocidades calculado adicionando-se a velocidade de escoamento do gás à velocidade termoforética, obtida dos gradientes locais de temperatura. A fim de determinar os efeitos das velocidades termoforéticas axiais na deposição de partículas, as equações que governam o problema foram consideradas na forma elíptica. Os resultados apresentados revelaram que a temperatura de entrada do gás pode gerar um gradiente de temperatura axial que produz velocidades termoforéticas axiais significativas e influenciam marcadamente a eficiência de deposição de partículas.

ABSTRACT

The present work sets forth a numerical simulation of the process of particle deposition in a laminar pipe flow subjected to external heating. The simulation is aimed at modelling the MCVD (Modified Chemical Vapor Deposition) process utilized in the fabrication of preforms for optical fiber production. In this process, the particles convected with the carrier gas are deposited on the inner wall of the pipe due to thermophoretic forces. The deposition efficiency is obtained by numerically solving the differential equations governing conservation of mass, momentum, energy, and chemical species (particle concentration). The latter equation was solved utilizing a velocity field calculated by adding the carrier gas velocity to the thermophoretic velocity, obtained from the local temperature gradients. In order to assess the effects of axial thermophoretic velocities on particle deposition, the governing equations were considered in their elliptic form. The results presented revealed that the inlet temperature of the carrier gas can generate axial temperature gradients which produce significant axial thermophoretic velocities and markedly influence the particle deposition efficiency.

ÍNDICE

I – INTRODUÇÃO	1
I.1 – O Processo de Fabricação de Fibras Óticas	2
I.1.1 – O Processo MCVD	4
I.1.2 – Os Processos OVD e VAD	6
I.2 – Descrição do Trabalho	8
I.2.1 – A Termoforésia	9
I.2.2 – Simulação do MCVD	10
I.3 – Revisão da Literatura	12
II – FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	16
II.1 – O Modelo	16
II.2 – Hipóteses	18
II.3 – Equações	19
II.3.1 – Velocidade Termoforética	19
II.3.2 – Equação da Continuidade	22
II.3.3 – Equação de Conservação da Quantidade de Movimento Linear	22
II.3.3.1 – Equação de Conservação da Quantidade de Movimento Linear na direção axial de de escoamento	23
II.3.3.2 – Equação de Conservação da Quantidade de Movimento Linear na direção radial de de escoamento	23
II.3.4 – Equação de Conservação de Energia	24
II.3.5 – Equação de Conservação de Massa de Partículas	25
II.4 – Equações Adimensionalizadas	26
II.4.1 – Equação Adimensional da Continuidade	26

II.4.2 – Equação Adimensional de Conservação de Quantidade de Movimento Linear na direção Axial	27
II.4.3 – Equação Adimensional de Conservação de Quantidade de Movimento Linear na direção Radial	27
II.4.4 – Equação Adimensional de Conservação de Energia	27
II.4.5 – Equação Adimensional de Conservação de Massa de Partículas	28
II.5 – Condições de Contorno	29
II.6 – Parâmetros Adimensionais	34
II.7 – Cálculo da Eficiência de Deposição	35
II.8 – Cálculo das Trajetórias das Partículas	36
III – FORMULAÇÃO NUMÉRICA	38
IV – ANÁLISE DOS RESULTADOS	44
IV.1 – Eficiência de Deposição	45
IV.1.1 – Influência da Temperatura de Entrada do Gás e do Número de Reynolds	45
IV.1.2 – Influência da Temperatura da Parede do Tubo	57
IV.1.3 – Influência da Espessura do Tubo	59
IV.1.4 – Comparação com Resultados Obtidos da Literatura	61
IV.2 – Trajetórias e Isotermas	66
IV.3 – Perfis de Velocidade, Temperatura e Concentração	76
IV.3.1 – Perfis de Velocidade	76
IV.3.2 – Perfis de Temperatura	83

IV.3.3 – Perfis de Concentração	86
IV.4 – Variação da Temperatura e Concentração com a Distância Axial.....	90
V – CONSIDERAÇÕES FINAIS	95
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	98
BIBLIOGRAFIA	99

NOMENCLATURA

a_I	coeficiente das equações discretizadas ($I = E, W, S, N, P$)
b	termo de fonte das equações discretizadas
c_P	calor específico do fluido
D	difusividade da partícula no fluido
D_i	condutância de difusão do fluido ($i = e, w, s, n$)
$E(L)$	eficiência global de deposição de partículas
$E(x)$	eficiência acumulativa de deposição de partículas
F_i	fluxo de massa do fluido ($i = e, w, s, n$)
$\vec{F}_T$	força termoforética
$\vec{F}_V$	força de arraste viscoso
k_f	condutividade térmica do fluido
k_s	condutividade térmica da partícula
k_p	condutividade térmica da parede
K	coeficiente termoforético
Kn	número de Knudsen
L	comprimento do tubo
$M(x)$	fluxo de massa local de partículas na parede interna do tubo
p	pressão no fluido
P	pressão adimensional no fluido
r	coordenada radial
R_i	raio interno do tubo
R_o	raio externo do tubo
R_p	raio da partícula
Re	número de Reynolds
Sc	número de Schmidt
T	temperatura do fluido
T_0	temperatura de entrada do fluido
T_T	temperatura da parede externa do tubo na zona da tocha

T_w	temperatura da parede externa do tubo fora da região do tubo
u, v	componentes da velocidade do fluido nas direções axial e radial
u_T, v_T	componentes da velocidade termoforética nas direções axial e radial
U, V	componentes da velocidade adimensional do fluido nas direções axial e radial
U_T, V_T	componentes da velocidade termoforética adimensional nas direções axial e radial
x	coordenada axial
x_{0T}	coordenada axial no começo da zona de aquecimento do tubo
x_{FT}	coordenada axial no final da zona de aquecimento do tubo
X	coordenada axial adimensional

Símbolos Gregos

η	coordenada radial adimensional
θ	temperatura adimensional do fluido
θ_0	temperatura adimensional na entrada do fluido
θ^*	temperatura adimensional característica
λ	caminho livre médio entre moléculas do fluido
μ	viscosidade absoluta do fluido
ν	viscosidade cinemática do fluido
ρ	densidade do fluido
ϕ	fração mássica adimensional de partícula
ω	fração mássica de partícula
ω_0	fração mássica de partícula na entrada do escoamento

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O presente trabalho tem por objetivo simular parte de um dos mais importantes processos de fabricação de pré-formas para produção de fibras óticas: o Processo Modificado de Deposição de Vapor Químico (MCVD, do inglês *Modified Chemical Vapor Deposition*). A pré-forma é uma barra cilíndrica de vidro de alta qualidade, fabricada de maneira a apresentar um perfil de índice de refração em sua seção reta que atenda às características óticas da fibra a ser produzida. Nos processos utilizados industrialmente a variação no índice de refração da pré-forma é obtida pela deposição sobre um substrato de pequenas partículas de vidro de composição variável, formando camadas que serão posteriormente consolidadas ao substrato. Durante o processo de fabricação parte das partículas não deposita no substrato, sendo perdidas para o ambiente. O conhecimento desta eficiência de deposição é fundamental para o sucesso do processo industrial, pois os custos de fabricação estão diretamente relacionados com este fator.

Para que seja possível uma melhor compreensão das contribuições do presente trabalho, uma breve descrição do processo de fabricação de fibras óticas será apresentada a seguir. Para maiores detalhes, sugere-se consultar a Referência [1].

I.1 – O Processo de Fabricação de Fibras Óticas

A comunicação por via ótica tornou-se viável comercialmente a partir da utilização de fibras óticas como guias de onda. Estas fibras são filamentos de vidro que possuem como característica principal uma variação radial pré-determinada do índice de refração. O processo de fabricação de fibras óticas envolve três etapas. Ele inicia-se com a fabricação da pré-forma. Esta etapa do processo é extremamente importante pois o perfil de índice de refração obtido na pré-forma será o mesmo apresentado na fibra ótica acabada.

A pré-forma contendo o perfil de índice de refração desejado é então levada a uma torre de estiramento. É aí que se inicia a segunda parte do processo de fabricação das fibras óticas: a transformação da pré-forma, cujo diâmetro varia de 15 a 18 mm na fibra ótica em sua forma final, cujo diâmetro assume valores da ordem de $100\ \mu\text{m}$. Para isto, como pode ser visto na Fig. 1.1, a pré-forma é introduzida em um forno, sendo aquecida a temperaturas da ordem de 2300 K, temperaturas estas suficientes para provocar fusão na sua extremidade inferior. O vidro fundido escoar verticalmente, formando um fio. Quando este fio atinge a parte inferior da torre de estiramento, já na fase sólida, é enrolado em um carretel. A fim de aumentar a resistência do vidro, a fibra é revestida com um polímero. Este revestimento, de espessura de aproximadamente $250\ \mu\text{m}$, tem que ser aplicado antes que a fibra toque qualquer superfície. O diâmetro desejado da fibra é obtido ajustando-se a velocidade de entrada da pré-forma no forno e a velocidade de enrolamento da fibra no carretel. Este ajuste é controlado por um medidor ótico de diâmetro.

Após a passagem pela torre de estiramento, a fibra é submetida a medições e caracterização. Neste ponto são feitas medições de perdas (em dB/Km), amplitude de onda (GHz Km), dimensões e resistência, entre outras.

Figura 1.1: Esquema do Processo de Estiramento na Produção de Fibras Ópticas

Os diversos processos de produção de fibras ópticas diferem apenas na fabricação da pré-forma. Atualmente, são utilizados industrialmente três diferentes processos: o Processo Modificado de Deposição de Vapor

Químico (MCVD), o Processo de Deposição Externa de Vapor (OVD, do inglês *Outside Vapor Deposition*) e o Processo de Deposição Axial de Vapor (VAD, do inglês *Vapor Axial Deposition*). Dentre estes o MCVD é o processo mais utilizado devido à sua maior flexibilidade e simplicidade.

A seguir é feita uma rápida descrição destes processos.

I.1.1 – O Processo MCVD

Um esquema simplificado do Processo Modificado de Deposição de Vapor Químico (MCVD) é mostrado na Fig. 1.2.

Figura 1.2: Esquema do Processo MCVD

Gases reagentes ($SiCl_4$, O_2 e outros) escoam laminarmente, a vazões da ordem de 3 a 4 l/min, no interior de um tubo horizontal de sílica fundido. O tubo, de diâmetro interno inicial na ordem de 15 a 30 mm e

comprimento da ordem de 1 m, é aquecido externamente por uma tocha de oxi-hidrogênio, de tamanho da ordem de um raio do tubo e temperatura em torno de 1700 a 2000 K. A tocha se move axialmente enquanto o tubo gira lentamente em torno de seu próprio eixo. Quando os gases frios se aproximam da zona da tocha eles se aquecem, atingindo temperaturas de reação, quando então se formam pequenas partículas de óxido de silício (SiO_2) e óxido de germânio (GeO_2), de diâmetros tipicamente da ordem de 0.15 a 0.8 μm . As partículas continuam escoando suspensas no fluido. Na região posterior à chama, a parede está a temperaturas em torno de 400 a 1000 K, inferiores à do gás. O gradiente de temperatura que se forma no gás faz surgir uma força (conhecida como força termoforética), que faz com que as partículas se movimentem na direção contrária ao gradiente de temperatura, i.e., faz com que elas se dirijam para a parede interna do tubo, podendo ou não atingí-la. Após uma determinada distância, quando as temperaturas do gás e da parede se equilibram, o movimento das partículas devida à termoforésia cessa, e as partículas remanescentes no escoamento, i.e., aquelas que não chegaram a se depositar, são carregadas pelo fluido até a exaustão. As características óticas de cada camada depositada são determinadas pela proporção dos gases reagentes introduzidos no tubo. Dessa maneira consegue-se produzir o perfil radial de índice de refração desejado. Em geral a tocha passa de 30 a 50 vezes, provocando um igual número de camadas de partículas depositadas. Após o término do processo de deposição é realizado o colapso do tubo, formando então uma barra (a pré-forma), pronta para a realização do passo seguinte no processo de fabricação das fibras óticas.

I.1.2 – Os Processos OVD e VAD

O processo de Deposição Externa de Vapor (OVD) é um pouco mais complexo do que o MCVD, o que restringe um pouco a sua utilização. Na Fig. 1.3 é apresentado um esquema simplificado do OVD.

Primeiramente são geradas partículas por meio de reações que ocorrem com o aquecimento de gases como $SiCl_4$, O_2 , etc. Este aquecimento é feito por uma tocha de oxi-hidrogênio posicionada transversalmente a uma barra refratária em rotação. As partículas se depositam nesta barra até atingir um nível de camadas considerado satisfatório. Logo em seguida, a barra é retirada e a pré-forma resultante é aquecida a temperaturas bastante elevadas (1700 a 2000 K), removendo as porosidades presentes e o espaço vazio que antes era ocupado pela barra, sendo que o último não ocorre necessariamente. Com isso, a pré-forma, agora homogênea, está pronta para o processo de estiramento.

O processo de Deposição Axial de Vapor (VAD) se distingue dos dois processos descritos acima (MCVD e OVD) porque a pré-forma é totalmente fabricada na direção axial, conforme mostra a Fig. 1.4. O processo é também simples e as velocidades de deposição obtidas são bastante elevadas.

Enquanto vai sendo empurrada na direção axial, a pré-forma, porosa, vai crescendo com a deposição de partículas de óxido de sílica. A fabricação é contínua porque a deposição e a consolidação são dispostas na mesma linha, o que não ocorre nos outros processos. Neste processo podem ser formadas pré-formas de diâmetros elevados, sendo por isso bastante utilizado na fabricação de grandes quantidades de fibras óticas.

Figura 1.3: Esquema do Processo OVD

a) Deposição das Partículas; b) Colapso; c) Estiramento

Figura 1.4: Esquema do Processo VAD

1.2 – Descrição do trabalho.

Como já foi dito anteriormente, o presente trabalho propôs a modelagem do processo MCVD. A motivação deste trabalho deveu-se a maior utilização deste processo em relação aos outros dois. Além disso, este é o único processo empregado no Brasil na fabricação das fibras ópticas. A eficiência de deposição de partículas neste processo é pequena (em torno de 30 a 50 %), o que motiva sua análise detalhada, pois a eficiência de deposição se relaciona diretamente com os custos finais de produção de fibras ópticas.

A eficiência de deposição das partículas pode ser calculada após o

estabelecimento do principal mecanismo responsável pelo movimento das partículas: a termoforésia. O mecanismo de termoforésia é explicado a seguir.

I.2.1 – A Termoforésia

A termoforésia é o mecanismo responsável pela movimentação de partículas de pequenos diâmetros em suspensão num fluido sujeito a gradientes de temperatura. Estes gradientes fazem com que o nível de atividade molecular do gás seja variável no espaço, i.e., as regiões de maior temperatura apresentam uma energia cinética maior do que as regiões a temperaturas inferiores. Esta variação induz uma força, conhecida como força termoforética, no sentido oposto ao gradiente de temperatura do gás, e a conseqüente movimentação da partícula nesta mesma direção. Mecanismos semelhantes à termoforésia são a fotoforésia (movimentação das partículas devido a gradientes de temperatura causados por diferentes graus de intensidades de luz) e a difusioforésia (movimentação das partículas provocada por gradientes de concentração dos componentes do fluido no qual as partículas estão suspensas). Estes mecanismos, também conhecidos como mecanismos radiométricos, são muito fracos e somente causam um movimento significativo das partículas devido à alta capacidade de mobilização destas. Em objetos macroscópicos, estes mecanismos são insignificantes, o que dificulta a percepção da sua existência.

Os primeiros estudos sobre a termoforésia foram estudos empíricos. Estes estudos foram motivados pela observação da existência de camadas livres de partículas sobre superfícies aquecidas [2]. É também o mecanismo da termoforésia que explica o escurecimento da cuba de um lampião de querosene: o gradiente de temperatura estabelecido entre a chama e a cuba (mais fria) faz com que as partículas de carbono produzidas no

processo de combustão se movimentem na direção da cuba, onde em geral elas se depositam.

Além do MCVD, a termoforésia tem importância prática em várias outras aplicações industriais, como por exemplo na remoção de partículas da ordem de microns pelos precipitadores térmicos. Além disso, ela pode contribuir na formação de depósitos de fumaça durante processos de combustão e de pequenas partículas no interior de tubos de um trocador de calor submetido a escoamentos de gás quente, ocasionando inclusive a redução da eficiência do trocador de calor.

A intensidade da força termoforética é função das propriedades do fluido e das partículas, do gradiente de temperatura no fluido e do número de Knudsen (razão entre o caminho livre médio entre moléculas de gás pelo diâmetro das partículas). Para números de Knudsen maiores do que a unidade, a termoforésia é o resultado apenas da transferência da quantidade de movimento das moléculas do fluido para a partícula. Esta se dá em maior intensidade do lado mais quente da partícula. Para números de Knudsen menores do que a unidade (ou da ordem de um) o mecanismo é mais complexo, pois também deve ser considerada a existência de um gradiente de temperatura na própria partícula. Neste caso, a força termoforética sofre a influência da razão entre as condutividades térmicas da partícula e do fluido. No MCVD, os valores de Knudsen são um pouco menores do que a unidade, fazendo com que a obtenção da força termoforética leve em consideração o gradiente de temperatura na partícula.

I.2.2 – Simulação do MCVD

A modelagem do processo de deposição de partículas no MCVD requer o conhecimento do campo de temperaturas e, portanto, do campo de velocidades do escoamento. Assim, para a determinação da eficiência do processo torna-se necessária a solução das equações de conservação

de massa, de quantidade de movimento linear e de energia. O cálculo da eficiência de deposição das partículas pode ser efetuado de duas maneiras: através da determinação da trajetória das partículas ao longo do tubo ou através do cálculo do fluxo de partículas na parede do tubo. Nesta segunda alternativa torna-se necessária a solução da equação de conservação de massa de partículas. Este último processo é mais preciso, embora o primeiro seja o mais empregado na literatura. O presente trabalho empregou a segunda alternativa, que pareceu ser o caminho natural, já que a equação de conservação de concentração de partículas foi resolvida após a solução da equação de conservação de energia.

Em geral, os modelos encontrados na literatura apresentam diversas simplificações nas soluções das equações de conservação. Mesmo assim porém, os resultados obtidos aparentemente concordam com os resultados experimentais [3]. Em todos os modelos analisados [3 - 7], foi utilizada a mesma hipótese simplificadora desprezando os termos de condução axial e termoforésia axial nas equações de conservação de energia e de concentração de partículas, respectivamente. O modelo aqui apresentado difere neste aspecto dos outros modelos: os termos axiais não foram desprezados, o que implicou na solução das equações de conservação na forma elíptica ao invés da forma parabólica. Como será demonstrado no decorrer do trabalho, os termos axiais podem alterar significativamente a eficiência da deposição das partículas. Uma outra hipótese empregada na literatura e também aqui utilizada foi a de manter constantes as propriedades do fluido e das partículas. Em todos os trabalhos analisados, o escoamento foi considerado hidrodinamicamente desenvolvido. No presente trabalho, estudou-se também a região em desenvolvimento.

Deve-se ressaltar que o presente trabalho restringiu-se ao cálculo da eficiência de deposição das partículas, não considerando o processo

de reação química para a formação das mesmas. Em uma modelagem completa, os mecanismos de reação devem ser incorporados, pois irão afetar a eficiência global do processo.

I.3 – Revisão da literatura

A seguir é feita uma breve descrição de alguns trabalhos estudados que visavam a modelagem do processo MCVD. Estes trabalhos serviram de base para os estudos realizados e comparação de alguns resultados obtidos.

Simpkins, Kosinski e MacChesney [3] resolveram o problema térmico analiticamente tendo como condições de contorno a temperatura da parede constante e temperatura de entrada do fluido uniforme. Além disso, foi desprezada a condução axial, recaindo no problema de Graetz [8]. Foram também realizados alguns experimentos determinando perfis de temperatura e taxa de deposição em função da distância axial, comprovando então que a termoforésia radial é o mecanismo predominante de deposição das partículas.

Walker, Homsy e Geyling apresentaram dois trabalhos distintos. No primeiro trabalho [5], o problema é dividido em outros dois: um válido para regiões na entrada do tubo enquanto que o outro é válido para o restante do tubo. Nos dois casos eles desprezam a condução axial de calor, tendo as mesmas condições de contorno utilizadas por *Simpkins* [3] na equação de conservação de energia. Além disso o problema foi considerado hidrodinamicamente desenvolvido. Na região de entrada as equações de conservação foram resolvidas analiticamente, sendo que na solução da equação de conservação de massa de partículas o problema foi subdividido em outros dois: o primeiro, que resolve a região bem próxima a parede, onde a difusão radial não pode ser desprezada e o segundo, que

resolve o restante do tubo, onde a difusão radial é desprezível. A condução e termoforésia axiais são desprezadas em todo o tubo. Em seguida, foi obtida uma expressão para a eficiência de deposição, baseada no cálculo do fluxo difusivo de partículas na parede. Este cálculo, segundo Walker, poderia também ser realizado baseando-se no cálculo do fluxo devido à termoforésia. No restante do tubo, i.e., para altas distâncias axiais, a equação da energia foi resolvida numericamente, embora ela continue apresentando solução analítica. A equação de conservação de massa de partículas não foi resolvida, já que a eficiência de deposição foi calculada pelas trajetórias das partículas. Foi obtida também uma expressão para o valor máximo da eficiência.

Os resultados obtidos para altas distâncias apresentaram boa concordância com aqueles obtidos para a região de entrada do tubo. Além disso, foram também comparados os resultados modificando-se a condição de contorno de temperatura na parede: foi utilizado um perfil linear de temperatura na direção axial ao invés da condição de salto na temperatura (i.e., temperatura elevada e constante na região da chama e baixa, também constante, fora da região da chama). A forma da curva da eficiência de deposição em função da distância axial diferiu nos dois casos, embora o valor encontrado para a eficiência global do processo tenha sido coincidente.

O segundo trabalho [6] compara resultados experimentais com resultados teóricos, sendo que estes últimos foram obtidos de forma análoga ao primeiro trabalho. Dessa forma, foi possível a comprovação de que a termoforésia é de fato o mecanismo responsável pelo processo de deposição de partículas no MCVD, devido à boa concordância dos resultados. Em seguida, foi obtido o perfil de temperaturas no tubo e então substituída a condição de contorno de temperatura na parede (condição de salto com temperatura constante), o que provocou uma melhora na

concordância entre os resultados. Foram feitas também comparações entre os resultados obtidos com um modelo teórico que considerava as propriedades variáveis. Os resultados do modelo com propriedades constantes mostraram-se bem próximos destes, fato que justifica a sua utilização, já que sua simplicidade é bem maior. Ao final, foi obtido novamente uma expressão para a eficiência de deposição, baseada nos dados experimentais, e que a coloca como função apenas das temperaturas de reação e de equilíbrio entre o fluido e a parede, que por sua vez, é função do número de Reynolds.

Outros dois trabalhos foram desenvolvidos por Wang *et al.* O primeiro trabalho [7] não trata especificamente do MCVD, mas analisa o aparecimento de uma força termoforética sobre partículas suspensas num fluido em escoamento no interior de um tubo vertical com paredes a temperatura constante, devida ao aquecimento proveniente de raios laser. Novamente, aqui são desprezados os termos de condução axial na equação de conservação de energia, assim como a termoforésia axial e os termos difusivos na equação de conservação de massa de partículas. Os problemas térmico e hidrodinâmico são resolvidos analiticamente. A equação de conservação de massa de partículas não foi resolvida, optando-se pela determinação das trajetórias. Notam-se claramente as melhorias expressivas no processo de deposição conforme vai sendo aumentada a intensidade dos raios laser. Uma observação importante foi feita no final do trabalho, quando é reconhecido que a não consideração dos termos axiais induz certos erros, embora a análise realizada continue valendo qualitativamente. Num segundo trabalho, Wang, Morse e Cipolla [4] analisam especificamente o efeito do raio laser na eficiência do processo de deposição das partículas. Neste caso foram usadas as mesmas hipóteses simplificadoras, desprezando-se os termos de condução axial, termoforésia axial e difusão, além da consideração da temperatura constante na parede

do tubo. As equações de energia e concentração são acopladas devido à dependência do coeficiente de absorção com a concentração local de partículas. Foi observada uma melhora sensível na eficiência de deposição das partículas, chegando-se a valores de até 90 %, além da obtenção de comprimentos de deposição bem menores.

Após esta breve introdução, onde comentou-se sobre o processo modelado e sua importância na indústria mundial, além de uma rápida exposição de alguns trabalhos publicados sobre o assunto, parte-se agora para a descrição do trabalho propriamente dito.

No Capítulo II é feita a descrição do modelo utilizado, quais as hipóteses consideradas e as equações diferenciais correspondentes. Em seguida, já no Capítulo III, é especificado o método numérico utilizado na solução das equações de conservação.

No Capítulo IV são colocados e analisados os resultados obtidos, além da comparação destes com alguns resultados já conhecidos da literatura.

No Capítulo V são referidas as principais conclusões e propostas algumas sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO II

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

II.1 – O Modelo

O modelo proposto visou a simulação do Processo Modificado de Deposição de Vapor Químico (MCVD), utilizado no processo de fabricação de fibras óticas. Na Fig. 2.1 é mostrado um esquema simplificado do modelo proposto.

Figura 2.1: Modelo Utilizado do Processo MCVD

Gás escoia no interior de um tubo circular de raio interno R_i e raio externo R_o . O escoamento é laminar e em regime permanente. O fluido é considerado incompressível. A velocidade de entrada do gás é uniforme e igual a u_0 , assim como é também a temperatura T_0 na entrada do

escoamento. Junto com o gás é inserida no tubo uma certa quantidade de partículas, sendo a concentração mássica ω_0 de partículas distribuída uniformemente na entrada do escoamento. De uma determinada posição axial x_{0T} até a posição igual a x_{FT} , a temperatura da parede externa é fixa em T_T . Fora desta região, a temperatura é fixa em T_W , sendo que T_W é menor do que T_T . A região de temperatura mais elevada visa a simular o aquecimento localizado por uma chama no tubo em rotação.

O processo de deposição das partículas ocorre da seguinte maneira: primeiramente, o calor é transferido da parede para o fluido (gás + partículas). Na direção radial, a troca de calor se dá, principalmente, por condução. Na direção axial, a situação é diferente, já que o maior responsável pela transferência de calor é a convecção. Como a condutividade térmica da parede é pequena, na região posterior à chama a parede encontra-se a uma temperatura inferior à temperatura do fluido nesta mesma posição axial, ocasionando então a existência de um gradiente de temperatura na direção radial, tal que a temperatura decresce em direção à parede. Este gradiente induz uma força (força termoforética) sobre as partículas no sentido oposto ao seu, fazendo com que as partículas se movimentem e, eventualmente se depositem na parede interna do tubo.

O modelo apresentado considerou apenas o movimento das partículas devido à difusão por gradientes de concentração (difusão browniana) e por gradientes de temperatura (termoforésia). Esta consideração tornou-se possível devido ao tamanho e natureza das partículas. No Processo Modificado de Deposição de Vapores Químicos as partículas têm um diâmetro da ordem de 0.1 a 1.0 μm . Nesta faixa de tamanho, tornou-se possível desprezar os efeitos da força gravitacional (em partículas da ordem de 1.0 μm , por exemplo, a força termoforética é da ordem de $1 \cdot 10^{-12}$ N. Este valor é cerca de 400 vezes maior do que o peso da partícula. [7]) e de empuxo. As forças acústicas e eletrostáticas, devido a natureza do

escoamento, foram também desprezadas.

II.2 – Hipóteses

Para a completa análise do processo de deposição de partículas por termoforésia foi necessária a solução das equações da continuidade, conservação de quantidade de movimento, conservação de energia e conservação de massa de partículas. As equações foram resolvidas na forma elíptica. Além disso foi necessário também o conhecimento da expressão que traduz o efeito da força termoforética sobre as partículas.

Foram feitas as seguintes hipóteses no modelo apresentado:

- i) Escoamento em regime permanente
- ii) Fluido Newtoniano
- iii) Escoamento bidimensional
- iv) Foram desprezadas as forças: eletrostáticas, gravitacional, acústica e empuxo, devido ao tamanho e natureza das partículas e/ou características do escoamento [3]
- v) A presença das partículas em suspensão no escoamento não altera os campos de velocidade e temperatura do fluido, devido ao pequeno tamanho das partículas ($\sim 0(1.0\mu\text{m})$) [3]. O fluido é tratado como um meio contínuo
- vi) As propriedades do fluido e das paredes foram consideradas invariantes com a temperatura e inalteradas pela presença das partículas
- vii) Fluido incompressível
- viii) Supôs-se que toda a partícula que atinge a superfície interna da parede é absorvida por ela

II.3 – Equações

II.3.1 – Velocidade Termoforética

Considerou-se o escoamento de um gás com partículas em suspensão. De acordo com a hipótese (iv), pode-se desprezar todas as forças atuantes sobre as partículas, com exceção das forças de arraste viscoso e termoforética. Considerando-se o referencial fixo à partícula e, devido ao pequeno tamanho das partículas, desprezando a sua inércia, a segunda Lei de Newton fornece a seguinte equação:

$$\vec{F}_V + \vec{F}_T = 0 \quad (2.1)$$

onde $\vec{F}_V$ é a força de arraste viscoso, dada pela seguinte expressão [9]:

$$\vec{F}_V = 6\pi\mu R_p \vec{v} \frac{(1 + 2C_m \lambda/R_p)}{(1 + 3C_m \lambda/R_p)} \quad (2.2)$$

Esta é a equação de Stokes de arraste viscoso, com correção de escorregamento (porque $\phi_p < 1\mu\text{m}$), obtida por Basset e válida para valores de números de Knudsen menores do que 0.1.

$\vec{F}_T$ representa a força termoforética, obtida inicialmente por Brock e dada pela seguinte expressão [9]:

$$\vec{F}_T = - \frac{12\pi\mu\nu R_p C_s (k_g/k_s + C_t \lambda/R_p)}{(1 + 3C_m \lambda/R_p) (1 + 2k_g/k_s + 2C_t \lambda/R_p)} \frac{\text{grad } T}{T} \quad (2.3)$$

Os valores C_m , C_t e C_s são respectivamente, o coeficiente de transferência de quantidade de movimento linear, o fator numérico obtido da teoria cinética dos gases, e o coeficiente de escorregamento térmico.

$Kn \equiv \lambda/R_p$ é o número de Knudsen, dado pela razão entre o caminho livre médio entre moléculas do gás e o raio da partícula.

Substituindo as expressões (2.2) e (2.3) na equação (2.1), chegou-se a uma expressão para a velocidade termoforética do gás em relação à partícula. A velocidade termoforética da partícula em relação ao gás é idêntica à obtida, porém com o sinal trocado:

$$\vec{v}_T = - \frac{2C_s \nu (k_g/k_s + C_t \lambda/R_p)}{(1 + 2C_m \lambda/R_p) (1 + 2k_g/k_s + 2C_t \lambda/R_p)} \frac{\text{grad } T}{T} \quad (2.4)$$

Embora esta expressão só seja válida para $Kn \leq 0.1$, devido a restrição imposta pela equação de Basset, observou-se que a dependência da velocidade termoforética com o gradiente de temperatura é mantida para todos os valores do número de Knudsen. No caso de regime molecular ($Kn > 1$) a velocidade termoforética independe da razão entre as condutividades térmicas do gás e das partículas, enquanto que num meio contínuo ($Kn < 1$) é estabelecido um gradiente de temperatura na partícula, fazendo com que a velocidade termoforética seja influenciada pela razão entre as condutividades térmicas [2]. No MCVD, o número de Knudsen é da ordem de 1 ou um pouco menor do que 1, o que faz com que o problema recaia no segundo caso.

Outras expressões para a velocidade termoforética com validade para diferentes valores de número de Knudsen foram obtidas, de diferentes maneiras [9]. Observou-se que todas estas expressões, assim como a equação (2.4) podem ser colocadas na seguinte forma:

$$\vec{v}_T = -\frac{K\nu}{T} \text{grad } T \quad (2.5)$$

Nesta equação, K é o coeficiente termoforético, que é uma função do número de Knudsen e da razão entre as condutividades térmicas do gás e das partículas; ν é a viscosidade cinemática do fluido; $\text{grad } T$ representa o gradiente de temperatura na vizinhança da partícula; e T é a temperatura do fluido na vizinhança da partícula.

Em coordenadas cilíndricas, e de acordo com a hipótese (iii), pode-se escrever:

$$\vec{v}_T = u_T \hat{e}_1 + v_T \hat{e}_2$$

onde u_T representa a velocidade termoforética da partícula na direção axial do escoamento dada pela equação:

$$u_T = -\frac{K\nu}{T} \frac{\partial T}{\partial x}$$

A componente v_T representa a velocidade termoforética da partícula na direção radial do escoamento e é dada pela equação:

$$v_T = -\frac{K\nu}{T} \frac{\partial T}{\partial r}$$

Os vetores $\hat{e}_1$ e $\hat{e}_2$ são os vetores unitários nas direções axial e radial de escoamento, respectivamente.

II.3.2 – Equação da Continuidade

A equação da continuidade para o problema, considerando-se as hipóteses (i), (iii) e (vi) pode ser escrita da seguinte maneira, utilizando-se coordenadas cilíndricas:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial (rv)}{\partial r} = 0 \quad (2.6)$$

onde u e v são respectivamente os componentes axial e radial da velocidade do escoamento $\vec{v}$:

$$\vec{v} = u\hat{e}_1 + v\hat{e}_2$$

II.3.3 – Equação de Conservação de Quantidade de Movimento Linear

Com a equação da continuidade e as hipóteses (ii) e (vi), chegou-se à seguinte expressão para a conservação de quantidade de movimento linear:

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\text{grad } p + \mu \text{div} (\text{grad } \vec{v}) \quad (2.7)$$

Considerando-se a hipótese de escoamento bidimensional a equação (2.7) foi desmembrada em duas equações escalares, que expressam o princípio de conservação nas direções axial e radial do escoamento.

II.3.3.1 – Equação de Conservação de Quantidade de Movimento Linear na Direção Axial de Escoamento

Considerando-se a hipótese (i), esta equação, obtida da equação (2.7), é dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial(uu)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rvu)}{\partial r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right] \quad (2.8)$$

Nesta equação, ρ representa a densidade do fluido; μ é a viscosidade absoluta do fluido; e $\partial p / \partial x$ representa o gradiente de pressão na direção axial de escoamento.

II.3.3.2 – Equação de Conservação de Quantidade de Movimento Linear na Direção Radial de Escoamento

Analogamente à equação (2.8), a equação que expressa a conservação de quantidade de movimento na direção radial do escoamento é dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rvv)}{\partial r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{v}{r^2} \right] \quad (2.9)$$

Nesta equação $\partial p / \partial r$ representa o gradiente de pressão na direção radial de escoamento.

II.3.4 – Equação de Conservação de Energia

A equação de conservação de energia foi obtida através da equação da continuidade e da consideração das seguintes hipóteses, além das hipóteses (i), (ii), (iii) e (vii):

- Escoamento a baixas velocidades
- Não há geração externa de calor

Chegou-se então à seguinte expressão:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rvT)}{\partial r} \right) = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right] \quad (2.10)$$

onde c_p é o calor específico do fluido e k a condutividade térmica do fluido.

É importante notar que esta equação resolve também o campo de temperatura na parede do tubo. Neste caso, ao invés das propriedades do fluido utilizam-se as propriedades da parede. Nota-se também que, na parede, o problema é apenas um problema de condução, pois as velocidades são nulas.

II.3.5 – Equação de Conservação de Massa de Partículas

Na ausência de forças de corpo, o processo de transferência de massa é um resultado dos gradientes de temperatura (termoforésia), concentração (difusão browniana) e pressão. A outra parcela de transferência de massa é devida à convecção. No problema estudado, a influência dos gradientes de pressão é considerada desprezível. A equação de conservação de massa de partículas contém então apenas o termo convectivo e os termos devidos aos gradientes de temperatura e concentração. Considerando a hipótese (vii) e a hipótese de que não há geração externa de massa, a equação de conservação de concentração de partículas pode ser expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho\omega)}{\partial t} + \vec{v}\text{grad}(\rho\omega) = \text{div}(D\text{grad}(\rho\omega) - \rho\omega\vec{v}_T) \quad (2.11)$$

Nesta equação, ω é a fração mássica de partículas, dada pela razão entre a massa da partícula e a massa total do fluido; D é o coeficiente de difusão da partícula no fluido; e $\vec{v}_T$ representa a velocidade termoforética da partícula, dada pela equação (2.5).

O primeiro termo do lado direito da equação (2.11) expressa a difusão de partículas por gradiente de concentração (difusão browniana). O segundo termo do lado direito desta mesma equação expressa a difusão de partículas por gradiente de temperatura (termoforésia). Os termos do lado esquerdo representam respectivamente a taxa de variação de concentração de massa e o transporte convectivo de massa.

Desenvolvendo-se a equação (2.11) e considerando-se a hipótese (i) e a equação da continuidade, que fornece:

$$\text{div } \vec{v} = 0$$

chegou-se à seguinte expressão para o princípio de conservação de partículas:

$$\operatorname{div}(\rho\omega(\vec{v} + \vec{v}_r)) = \operatorname{div}(D\operatorname{grad}(\rho\omega)) \quad (2.12)$$

Considerando-se as hipóteses (iii) e (vi), a equação de conservação de massa de partículas é expressa por:

$$\frac{\partial}{\partial x} [(u + u_r)\omega] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r(v + v_r)\omega] = D \left[\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \omega}{\partial r} \right) \right] \quad (2.13)$$

II.4 – Equações Adimensionalizadas

As equações fornecidas no item 2.3 são dadas a seguir em sua forma adimensional:

II.4.1 – Equação Adimensional da Continuidade

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial(\eta V)}{\partial \eta} = 0 \quad (2.14)$$

II.4.2 – Equação Adimensional de Conservação de Quantidade de Movimento Linear na Direção Axial

$$\frac{\partial(UU)}{\partial X} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial(\eta VU)}{\partial \eta} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial U}{\partial \eta} \right) \right] \quad (2.15)$$

II.4.3 – Equação Adimensional de Conservação de Quantidade de Movimento Linear na Direção Radial

$$\frac{\partial(UV)}{\partial X} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial(\eta VV)}{\partial \eta} = -\frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial V}{\partial \eta} \right) - \frac{V}{\eta^2} \right] \quad (2.16)$$

II.4.4 – Equação Adimensional de Conservação de Energia

$$\frac{\partial(U\theta)}{\partial X} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial(\eta V\theta)}{\partial \eta} = \frac{1}{PrRe} \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right) \right] \quad (2.17)$$

II.4.5 – Equação Adimensional de Conservação de Massa de Partículas

$$\frac{\partial}{\partial X} [(U + U_T)\phi] + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} [\eta(V + V_T)\phi] = \frac{1}{ScRe} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) \right] \quad (2.18)$$

Foram utilizadas as seguintes variáveis adimensionais na obtenção das equações (2.14) a (2.18):

$$U = \frac{u}{u_0}$$

$$V = \frac{v}{u_0}$$

$$\theta = \frac{(T - T_w)}{(T_T - T_w)}$$

$$\phi = \frac{\omega}{\omega_0}$$

$$\eta = \frac{r}{R_i}$$

$$X = \frac{x}{R_i}$$

$$P = \frac{p}{\rho u_0^2}$$

$$Re = \frac{\rho u_0 R_i}{\mu}$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$$

$$Pe = \frac{R_i u_0}{(k/\rho c_p)}$$

$$U_T = -\frac{1}{Re} \frac{K}{(\theta + \theta^*)} \frac{\partial \theta}{\partial X}$$

$$V_T = -\frac{1}{Re} \frac{K}{(\theta + \theta^*)} \frac{\partial \theta}{\partial \eta}$$

onde u_0 é a velocidade de entrada do escoamento; T_r a temperatura da parede externa na chama; T_w a temperatura da parede externa fora da chama; ω_0 a concentração de partículas na entrada do escoamento; e a temperatura θ^* é dada por:

$$\theta^* = \frac{T_w}{(T_r - T_w)}$$

II.5 – Condições de Contorno

O problema proposto apresenta as seguintes condições de contorno para as componentes axial e radial da velocidade, temperatura e concentração, de acordo com a Fig. 2.2.

Figura 2.2: Modelo Utilizado para o Processo MCVD

- i) Condição de não deslizamento e impermeabilidade do fluido na parede:

$$u(x, R_i) = 0.$$

$$v(x, R_i) = 0.$$

- ii) Simetria do problema em relação ao eixo central do tubo:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=0} = 0.$$

$$v(x, 0) = 0.$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial \omega}{\partial r} \right|_{r=0} = 0.$$

- iii) Considerando-se que toda partícula que atinge a superfície é absorvida por ela, pode-se escrever:

$$\omega(x, R_i) = 0.$$

- iv) Condição de contorno na saída do escoamento: difusão nula na saída

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=L} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial x} \right|_{x=L} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=L} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial \omega}{\partial x} \right|_{x=L} = 0.$$

v) Condições de entrada do escoamento:

$$u(0, r) = \begin{cases} u_0, & \text{para } 0 \leq r < R_i; \\ 0, & \text{para } R_i \leq r \leq R_o \end{cases}$$

$$v(0, r) = 0.$$

$$T(0, r) = T_0.$$

$$\omega(0, r) = \begin{cases} \omega_0, & \text{para } 0 \leq r < R_i; \\ 0, & \text{para } R_i \leq r \leq R_o \end{cases}$$

vi) Condição de temperatura constante na parede externa:

$$T(x, R_o) = \begin{cases} T_T, & \text{para } x_{0T} \leq x \leq x_{FT}; \\ T_W, & \text{para } 0 \leq x < x_{0T} \text{ ou } x_{FT} < x \leq L \end{cases}$$

vii) Condição de compatibilidade entre o fluido e a parede:

$$-k_p \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_i^+} = -k_f \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_i^-}$$

As condições de contorno na forma adimensional são dadas a seguir:

i) Condição de não deslizamento do fluido na parede:

$$U(X, 1) = 0.$$

$$V(X, 1) = 0.$$

ii) Simetria do problema em relação ao eixo central do tubo:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0.$$

$$V(X, 0) = 0.$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0.$$

iii) Considerando-se que toda partícula que atinge a superfície é absorvida por ela, pode-se escrever:

$$\phi(X, 1) = 0.$$

iv) Condição de contorno na saída do escoamento: difusão nula na saída

$$\left. \frac{\partial U}{\partial X} \right|_{X=L/R_i} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial V}{\partial X} \right|_{X=L/R_i} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial X} \right|_{X=L/R_i} = 0.$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial X} \right|_{X=L/R_i} = 0.$$

v) Condições de entrada do escoamento:

$$U(0, \eta) = \begin{cases} 1, & \text{para } 0 \leq \eta < 1; \\ 0., & \text{para } 1 \leq \eta \leq R_o/R_i \end{cases}$$

$$V(0, \eta) = 0.$$

$$\theta(0, \eta) = \theta_o = \frac{(T_o - T_w)}{(T_T - T_w)}$$

$$\phi(0, \eta) = \begin{cases} 1, & \text{para } 0 \leq \eta < 1; \\ 0., & \text{para } 1 \leq \eta \leq R_o/R_i \end{cases}$$

vi) Condição de temperatura constante na parede externa:

$$\theta(X, \eta_o) = \begin{cases} 1, & \text{para } x_{oT}/R_i \leq X \leq x_{FT}/R_i; \\ 0., & \text{para } 0. \leq X < x_{oT}/R_i \text{ ou } x_{FT}/R_i < X \leq L/R_i \end{cases}$$

vii) Condição de compatibilidade entre o fluido e a parede:

$$-k_p \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1^+} = -k_f \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1^-}$$

II.6 – Parâmetros adimensionais

Analisando-se as equações adimensionais obtidas e as condições de contorno do problema, chegou-se ao seguinte grupo de parâmetros adimensionais relevantes ao problema estudado:

- i) L/R_i – razão de aspecto
- ii) R_o/R_i – razão entre os raios externo e interno do tubo
- iii) Re – número de Reynolds do escoamento, baseado no raio interno do tubo
- iv) Pe – número de Peclet do escoamento, também baseado no raio interno do tubo
- v) Sc – número de Schmidt
- vi) K – coeficiente termoforético
- vii) k_p/k_f – razão entre as condutividades térmicas da parede e do fluido
- viii) θ^* – razão entre a temperatura mínima (temperatura da parede fora da região da chama) e a diferença máxima de temperaturas
- ix) θ_0 – temperatura adimensional de entrada do fluido
- x) x_{0T}/R_i – razão entre a posição inicial da chama e o raio interno do tubo
- xi) x_{FT}/R_i – razão entre a posição final da chama e o raio interno do tubo

II.7 – Cálculo da eficiência de deposição

O procedimento para o cálculo da eficiência de deposição das partículas baseou-se na solução da equação de conservação de massa de partículas. Embora este procedimento já tenha sido citado na literatura [5], aparentemente ele nunca foi empregado no cálculo da eficiência de deposição. Em geral, a eficiência é calculada a partir da determinação das trajetórias das partículas. Neste caso, não é necessário o conhecimento do campo de concentração de partículas. No presente trabalho, o campo de concentração de partículas foi determinado, o que fez com que a primeira opção se tornasse a mais natural. Além disso, esta opção parece ser também a mais precisa.

Sendo assim, a eficiência da deposição foi definida como a razão entre o fluxo de massa de partículas que se depositou e o fluxo de massa de partículas que entrou no tubo.

O fluxo de partículas na entrada do escoamento é dado por:

$$M|_{x=0} = \rho u_0 \omega_0 \pi R_i^2 \quad (2.19)$$

O fluxo de partículas que se depositou foi calculado, para cada posição axial do tubo, utilizando-se o componente radial positivo da velocidade termoforética da partícula na parede. Esta aproximação tornou-se possível apenas após a hipótese de um número de Schmidt muito alto, o que significa que a difusão só é relevante numa camada extremamente fina próxima a parede. Dessa forma, o fluxo de massa de partículas que atinge um elemento de área da parede igual a $2\pi R_i dx$ é dado por:

$$dM = \begin{cases} 2\pi R_i \rho v_T(x, R_i) \omega(x, R_i) dx, & \text{se } v_T > 0; \\ 0, & \text{se } v_T \leq 0. \end{cases} \quad (2.19)$$

A eficiência de deposição na posição axial x é então dada por:

$$E(x) = \frac{1}{\rho u_0 \omega_0 \pi R_i^2} \int_0^x dM \quad (2.20)$$

II.8 – Cálculo das Trajetórias das Partículas

As trajetórias das partículas foram determinadas após a definição do campo de velocidades das partículas. A velocidade da partícula é dada por:

$$\vec{v} = \frac{d\vec{s}}{dt} \quad (2.21)$$

onde $\vec{v} = u\hat{e}_1 + v\hat{e}_2$

A posição da partícula no instante t é dada por:

$$\vec{s} = x\hat{e}_1 + r\hat{e}_2$$

onde x é a posição da partícula na direção axial; e y é a posição da partícula na direção radial.

As componentes da velocidade nas direções axial e radial respectivamente, são dadas por:

$$u = \frac{dx}{dt}$$

$$v = \frac{dy}{dt}$$

Assim,

$$\frac{dr}{dx} = \frac{v}{u}$$

Para a determinação da trajetória $r(x)$ foi utilizado o método de integração de Euler. Então:

$$r(x) = r(x - \Delta x) + \frac{dr}{dx} \Delta x \quad (2.22)$$

Este método, embora não seja muito preciso, mostrou-se adequado já que a análise das trajetórias era apenas uma análise qualitativa, pois as trajetórias não foram utilizadas no cálculo da eficiência de deposição.

CAPÍTULO III

FORMULAÇÃO NUMÉRICA

As equações da continuidade, conservação da quantidade de movimento linear, conservação de energia e conservação de massa de partículas, descritas no Capítulo anterior, podem ser colocadas sob uma forma geral, dada por:

$$\text{div}(\rho \vec{u} \psi) = \Gamma \text{div}(\text{grad } \psi) + S \quad (3.1)$$

onde $\vec{u}$ representa uma velocidade; ψ é a variável dependente; Γ é o coeficiente de difusão, que varia de acordo com a variável dependente; e S representa o termo de fonte, o qual também varia de acordo com a variável dependente. Neste problema, a variável dependente ψ assumiu os seguintes valores:

- i) $\psi = 1$, na solução da equação de continuidade
- ii) velocidade do escoamento, na solução das equações de conservação de quantidade de movimento linear
- iii) temperatura, na solução da equação de energia
- iv) concentração, na solução da equação de conservação de massa de partículas

À exceção de alguns casos particulares (como por exemplo o problema de Graetz em transmissão de calor), a solução analítica para estas equações não é conhecida. Com isso, os resultados foram obtidos a partir da solução numérica das equações.

O método numérico utilizado foi desenvolvido por S. V. Patankar [10], e é conhecido como método de volumes finitos. O método utiliza a formulação em volumes de controle e o método de diferenças finitas

para a obtenção das equações do tipo (3.1) em sua forma discretizada. A formulação em volumes de controle garante o princípio de conservação em cada volume de controle e, portanto, por todo o domínio, qualquer que seja o número de pontos nodais da malha utilizada.

O esquema ou perfil interpolador utilizado no método de diferenças finitas foi o Power-Law, descrito por Patankar [10], que fornece uma boa aproximação da solução exata.

A equação (3.1) para escoamento bidimensional na forma discretizada é dada por:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (3.2)$$

onde os índices P , E , W , N e S representam os nós principal, a leste, a oeste, a norte e a sul, respectivamente, de acordo com a Fig. 3.1; e b é o termo de fonte.

Figura 3.1: Discretização do Domínio

Os coeficientes a_P , a_E , a_W , a_N e a_S variam de acordo com o perfil ou esquema utilizado. No esquema Power-Law os coeficientes são dados por:

$$a_E = D_e \llbracket 0, (1 - 0.1 \frac{F_e}{D_e})^5 \rrbracket + \llbracket 0, -F_e \rrbracket \quad (3.3)$$

onde F_e representa o fluxo de massa na face e do volume de controle em torno do nó P , dado por:

$$F_e = \rho_e u_e$$

D_e é a condutância de difusão na face e do volume de controle em torno do nó P , dada por:

$$D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_e}$$

O símbolo $\llbracket x, y \rrbracket$ significa o valor máximo entre x e y .

As expressões para os coeficientes a_W , a_N e a_S são análogas à equação (3.3).

O coeficiente a_P é dado por:

$$a_P = \sum a_{nb} + b + (F_e - F_w + F_n - F_s) \quad (3.4)$$

onde a_{nb} são os coeficientes da vizinhança do nó P , i.e., a_E , a_W , a_N e a_S .

Se o campo de velocidades satisfaz a equação da continuidade, a equação (3.4) se reduz a:

$$a_p = \sum a_{nb} + b \quad (3.5)$$

As equações da continuidade e conservação de quantidade de movimento; conservação de energia e conservação de massa de partículas foram resolvidas de forma desacoplada. Primeiramente, foram resolvidas as equações de continuidade e conservação de quantidade de movimento, através do algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [10], que acopla estas duas equações. Com a obtenção do campo de velocidades do escoamento, foi resolvida então a equação de conservação de energia. Com o campo de temperaturas foi obtida a velocidade termoforética das partículas. Esta, por sua vez, foi adicionada à velocidade do escoamento, determinando-se então o campo de velocidades das partículas. Com este novo campo de velocidades, que não satisfaz a equação da continuidade, foi então resolvida a equação de conservação de massa de partículas. É importante notar que nas equações de conservação de quantidade de movimento e conservação de energia, onde o campo de velocidades é o campo de velocidades do escoamento, que satisfaz a equação da continuidade, o coeficiente a_p é dado pela equação (3.5). Porém, na solução da equação de conservação de massa de partículas o coeficiente a_p é dado pela equação (3.4), já que o novo campo de velocidades não mais satisfaz a equação da continuidade.

Para a resolução do sistema linear resultante da discretização das equações (3.1) (equações do tipo (3.2)) foi utilizado um método indireto de solução (método iterativo). O método é conhecido como TDMA (*Tri-diagonal Matrix Algorithm*) linha por linha [10], que consiste

numa combinação do método direto unidimensional TDMA e o método de Gauss-Seidel.

Foi também utilizado o Método de Correção por Blocos (Settari e Aziz, 1973), com o objetivo de acelerar a taxa de convergência do método TDMA linha por linha.

Foi empregada uma malha 42x22 não uniforme tanto na direção axial quanto na direção radial. Foram feitos alguns testes para a definição da malha. Inicialmente, testou-se apenas a não uniformidade da malha na direção radial. Este teste baseou-se na comparação dos valores do número de Nusselt e do produto do fator de atrito pelo número de Reynolds (fRe) para um escoamento laminar desenvolvido no interior de um tubo circular com temperatura constante e uniforme na parede. Compararam-se os valores obtidos da solução numérica proposta com os valores obtidos da solução exata [8]. A malha escolhida apresentou erro de:

- 1.78 % no valor do número de Nusselt
- 0.99 % no valor do produto do fator de atrito pelo número de Reynolds

Na direção axial de escoamento a malha foi dividida em duas regiões de malha uniforme:

- $0 \leq x \leq (x_{FT} + (x_{FT} - x_{0T})/2)$, região de malha mais fina
- $(x_{FT} + (x_{FT} - x_{0T})/2) < x \leq L$, região de malha mais grosseira

Todas as equações foram resolvidas em sua forma dimensional. Os campos de velocidade, temperatura e concentração foram adimensionalizados após a obtenção dos resultados finais.

Esta maneira de resolver o problema permitiu a realização de mais alguns testes para a verificação da validade das equações. Estes testes eram realizados modificando-se os valores (dimensionais) das propriedades, dimensões e condições de contorno de forma que os parâmetros adimensio-

nais permanecessem com os mesmos valores. Verificou-se que os resultados adimensionais permaneceram inalterados, conforme o esperado.

O cálculo da eficiência de deposição das partículas foi efetuado após a determinação dos campos de velocidade, temperatura e concentração.

Com o objetivo de atingir a taxa de convergência considerada satisfatória foram utilizados os seguintes valores para o número de iterações e fatores de relaxação em cada uma das equações resolvidas:

i) Equações da continuidade e de conservação de quantidade de movimento linear:

- 150 iterações

- fator de relaxação : 0.8 para a equação da continuidade; e 0.5 para a equação de conservação de quantidade de movimento linear

ii) Equação de conservação de energia:

- 150 iterações

- fator de relaxação: 1.0

iii) Equação de conservação de massa de partículas:

- 200 iterações

- fator de relaxação: 0.5 para os casos sem parede e 1.0 para os casos com parede

Com estes valores o programa gastava em média 300 a 400 segundos de CPU para a sua execução. Tanto a compilalação como a execução do programa foram realizadas no computador Cyber 170/835 da CDC.

Todo o programa foi feito em linguagem FORTRAN V.

CAPÍTULO IV

ANÁLISE DOS RESULTADOS

Como pôde ser verificado nos capítulos anteriores, o problema é dependente de diversos parâmetros adimensionais, tais como: a razão de aspecto L/R_i ; o número de Reynolds Re ; o número de Prandtl Pr ; o número de Schmidt Sc ; o coeficiente termoforético K ; a temperatura adimensional θ^* caracterizando a temperatura da parede; a temperatura adimensional de entrada do gás θ_0 e a razão entre a espessura da parede do tubo e o raio interno t/R_i . Devido à grande quantidade de parâmetros envolvidos, não foi possível a realização de um estudo paramétrico completo do problema. Dessa forma, foram escolhidos alguns parâmetros a serem fixados, enquanto o restante era variado de acordo com o caso a ser analisado. A escolha dos parâmetros a serem mantidos constantes baseou-se nos resultados teóricos e experimentais existentes na literatura. Foram fixados os valores dos seguintes parâmetros adimensionais:

- i) $L/R_i = 20$. – Embora esta razão seja um pouco abaixo da real, ela demonstrou, em testes realizados previamente, ser suficiente para que sejam atingidos os desenvolvimentos hidrodinâmico e térmico, além do fato de que, tipicamente, não há mais deposição a partir deste comprimento.
- ii) $Pr = 0.7$ – Valor característico do número de Prandtl para o O_2 .
- iii) $Sc = 10^5$ – Valor encontrado na literatura [5] como característico do MCVD. É importante observar que este valor de Sc torna praticamente desprezíveis os termos de difusão na equação de conservação de concentração de massa de partículas.
- iv) $K = 0.9$ – Valor característico do coeficiente termoforético no processo MCVD.

Além disso foram fixados os valores das posições inicial e final da tocha: $x_{0T}/R_i = 0.0$ e $x_{FT}/R_i = 1.0$.

Um detalhado estudo dos efeitos dos outros parâmetros pertinentes ao problema é apresentado a seguir. Dessa forma, são discutidos resultados considerando ou não o efeito de uma espessura de parede do tubo (casos com parede e sem parede). Nos casos com parede, as condições de contorno térmicas são impostas na superfície externa do tubo, e o problema térmico é resolvido também dentro da parede sólida. Nos casos sem parede, as condições de contorno térmicas são impostas na superfície interna do tubo. Nos casos com parede foi fixada a razão entre as condutividades térmicas da parede e do fluido: $k_p/k_f = 10$. Também são analisados os efeitos da temperatura da parede, caracterizada pela temperatura adimensional θ^* , da temperatura de entrada do gás θ_0 e do número de Reynolds Re .

IV.1 – Eficiência de Deposição

IV.1.1 – Influência da Temperatura de Entrada do Gás e do Número de Reynolds

A fim de se analisar a influência de θ_0 e Re na eficiência de deposição são comentados a seguir alguns resultados obtidos mantendo-se constante a temperatura da parede externa do tubo e considerando nula a espessura da parede do tubo.

Nas Figs. 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 pode-se observar o efeito da temperatura de entrada do gás na eficiência de deposição de partículas $E(x)$. Nestas figuras foi plotada a eficiência de deposição em função da coordenada axial adimensional x/R_i , para números de Reynolds iguais a 3, 7, 14 e 30, e temperaturas adimensionais θ_0 iguais a 1, 0.5, 0 e -0.5.

Figura 4.1: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

Analisando separadamente cada uma das quatro figuras pode-se observar a existência de um comprimento de aquecimento, onde não ocorre deposição. Após o término desta região, a eficiência da deposição aumenta progressivamente até um ponto onde a deposição das partículas cessa, quando então a eficiência não mais varia. Pode-se observar também a forte dependência da eficiência da deposição com a temperatura adi-

Figura 4.2: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

mensional de entrada do gás. A eficiência de deposição decresce com o valor de θ_0 , chegando inclusive a zero, ou seja, em certos casos não há deposição de partículas. Isto ocorre para $\theta_0 = 0.0$ e 0.5 quando $Re = 3$, e para $\theta_0 = -0.5$ para todos os valores de Reynolds. Para baixos valores de Reynolds, a influência de θ_0 é bem mais pronunciada.

Até agora, todos os trabalhos consideravam a temperatura de en-

Figura 4.3: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

trada do gás igual a temperatura da chama, i.e., $\theta_0 = 1.0$. Portanto, estes resultados, aparentemente, nunca foram obtidos anteriormente.

A forte dependência da eficiência de deposição na temperatura adimensional de entrada do gás pode ser explicada pela existência de forças termoforéticas atuando sobre as partículas (na direção contrária ao gradiente de temperatura) ao mesmo tempo em que elas são carregadas por

Figura 4.4: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

convecção ao longo do tubo. Assim, a redução da temperatura de entrada do gás implica no aparecimento de gradientes de temperatura axial e radial bastante intensos na região de entrada do tubo. O gradiente da temperatura axial se dá no mesmo sentido do escoamento do gás. Dependendo da intensidade deste gradiente e do valor do número de Reynolds do escoamento, as partículas podem se movimentar na direção contrária

à do escoamento, saindo pela entrada do tubo. Esta perda de partículas na direção axial pode reduzir consideravelmente o valor da eficiência de deposição das partículas. Este resultado não foi previsto em nenhum dos modelos analisados, já que a termoforésia axial nem era considerada. Além disso, a eficiência de deposição das partículas também é reduzida pelo efeito da termoforésia radial, que direciona as partículas para o centro do tubo.

Nas Figs. 4.5 e 4.6 foram plotados os valores da eficiência de deposição em função da distância axial, para quatro números de Reynolds e temperaturas adimensionais de entrada do gás iguais a 1.0 (Fig. 4.5) e 0.5 (Fig. 4.6). Pode-se observar que o comprimento de deposição é diretamente proporcional ao número de Reynolds do escoamento. O comportamento destes gráficos pode ser explicado pelo fato de que para números de Reynolds mais altos o equilíbrio térmico entre as temperaturas do fluido e da parede é atingido mais lentamente.

Figura 4.5: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

Ainda observando-se as Figs. 4.5 e 4.6 e também a Fig. 4.7 pode-se perceber de maneira mais clara a influência da temperatura de entrada do gás na eficiência de deposição das partículas. Na Fig. 4.7 foi plotada a variação da eficiência global de deposição em função do número de Reynolds, para dois valores diferentes de temperatura de entrada do gás ($\theta_0 = 1.0$ e 0.5). Como pode-se perceber, para $\theta_0 = 1.0$, a eficiência

Figura 4.6: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

de deposição das partículas é tanto maior quanto menor for o número de Reynolds. Para $\theta_0 = 0.5$ a situação se inverte, i.e., quanto maior o número de Reynolds, maior o valor da eficiência de deposição. Este comportamento se deve ao fato de que, para temperatura de entrada do gás igual a temperatura da tocha (i.e., $\theta_0 = 1.0$) o gradiente de temperatura na direção axial na entrada do tubo é nulo. Conseqüentemente, as partículas

Figura 4.7: Eficiência de Deposição em Função do Número de Reynolds

que entram no tubo ou vão se depositar na parede do tubo devido à existência da termoforésia radial, ou são carregadas, por convecção, até a saída do tubo. Com o aumento do número de Reynolds, mais partículas são carregadas para fora do tubo, justificando o decréscimo da eficiência de deposição.

Para $\theta_0 = 0.5$, i.e., temperatura de entrada do gás menor do que

a temperatura da chama, existe um gradiente de temperatura na região de entrada do gás e no sentido do escoamento. Assim, é induzida uma força termoforética (e, portanto uma velocidade termoforética) no sentido oposto ao do escoamento, fazendo com que algumas partículas saiam do tubo pelo seu plano de entrada. O número de partículas que sai é função do número de Reynolds. Para números de Reynolds mais elevados, mais partículas se movimentam para dentro do tubo, podendo eventualmente se depositarem devido ao gradiente de temperaturas na direção radial (i.e., termoforésia radial). Dessa forma, a eficiência da deposição de partículas aumenta com o valor do número de Reynolds.

Os resultados aqui apresentados evidenciam a importância do termo devido à termoforésia axial na equação de conservação de concentração de massa de partículas.

As Figs. 4.8 e 4.9 foram construídas a fim de analisar a influência dos termos axiais nas equações de conservação de energia e de concentração de partículas. Para tal, é feita uma comparação entre os valores da eficiência de deposição em função da distância axial, para o modelo aqui descrito e para um modelo onde estes termos são desprezados (modelos encontrados na literatura). São analisados, para dois números de Reynolds distintos ($Re = 3$ e 30), os resultados com temperatura de entrada do gás igual a temperatura da chama ($\theta_0 = 1.0$) e temperatura de entrada do gás menor que a temperatura da chama ($\theta_0 = 0.5$).

Figura 4.8: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

Para $Re = 30$ (Fig. 4.9) e $\theta_0 = 1.0$ não existe diferença entre os dois modelos, i.e., a termoforésia axial pode ser desprezada sem prejuízo nos valores calculados para a eficiência de deposição. Quando o valor da temperatura de entrada do gás é reduzido ($\theta_0 = 0.5$) nota-se uma diferença significativa para os valores da eficiência de deposição: o modelo que não considera os termos axiais fornece resultados mais altos para a eficiência

Figura 4.9: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

de deposição. Para números de Reynolds mais baixos ($Re = 3$, Fig. 4.8) a diferença entre os dois modelos é sentida para ambos os valores de θ_0 , i.e., para temperatura de entrada do gás igual e menor do que a temperatura da chama. No primeiro caso, o modelo com termos axiais fornece valores um pouco mais altos para a eficiência de deposição. Este fato mostra que neste caso o efeito da termoforésia axial é desprezível, e que, devi-

do ao baixo valor do número de Reynolds, a condução axial passa a ser significativa. Isto aumenta (em módulo) o gradiente de temperatura na direção radial, aumentando conseqüentemente a eficiência de deposição das partículas. No segundo caso, quando a temperatura de entrada do gás é menor do que a temperatura da chama, ocorre o inverso. Isto é, o modelo que não considera termos axiais superestima os valores da eficiência, demonstrando que neste caso a termoforésia axial existe e seu efeito é muito mais significativo do que o efeito provocado pela condução axial.

IV.1.2 – Influência da Temperatura da Parede do Tubo

A influência da temperatura da superfície interna do tubo, fora da região da chama, nos valores da eficiência da deposição das partículas pode ser observada na Fig. 4.10.

Figura 4.10: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

Nesta figura é plotada a variação da eficiência de deposição com a distância axial, para dois valores distintos de temperaturas da parede externa ($\theta^* = 1$ e $1/3$) para $Re = 3$ e temperatura de entrada do gás igual a temperatura da chama. Pode-se perceber que a eficiência de deposição aumenta consideravelmente com a redução da temperatura da parede, o que é explicável pelo aumento do gradiente de temperatura na direção

rádial.

IV.1.3 – Influência da Espessura do Tubo

Foi analisada também a variação da eficiência de deposição com a espessura da parede, colocando-se uma espessura de parede t/R_i igual a 0.5.

Observando as Figs. 4.11 e 4.12 percebe-se que quanto maior a espessura da parede maior a eficiência de deposição das partículas. Na Fig. 4.11 é plotado um gráfico da variação da eficiência de deposição em função da distância axial, para a temperatura de entrada do gás igual a temperatura da chama ($\theta_0 = 1.0$). Na Fig. 4.12 é plotado o mesmo gráfico, porém com temperatura de entrada do gás menor do que a temperatura da chama ($\theta_0 = 0.5$). Este comportamento pode ser explicado pelo fato de que a temperatura da parede interna é menor do que a temperatura da chama pois existe um gradiente de temperatura na parede. Dessa forma, os gradientes de temperatura no fluido na direção radial, e portanto a termoforésia radial, são bem maiores do que quando a parede não é considerada. No caso em que a temperatura de entrada do gás é menor do que a temperatura da chama, esta diferença é bem mais intensa porque neste caso a temperatura do fluido é menor do que no caso sem parede (já que existe perda de calor na parede também) e portanto os gradientes de temperatura na direção axial na entrada do tubo são menores, fazendo com que a termoforésia axial seja menos intensa. Conseqüentemente, menos partículas saem do tubo por sua seção de entrada, escoando então junto com o gás para o interior do tubo e eventualmente se depositando em regiões posteriores à região da chama.

Figura 4.11: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

Figura 4.12: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial

IV.1.4 – Comparação com Resultados Obtidos da Literatura

Alguns resultados aqui obtidos podem ser comparados com resultados encontrados na literatura.

Nas Figs. 4.13 e 4.14 é apresentada uma comparação com os resultados obtidos por Walker, Geyling e Nagel [5] entre a eficiência de deposição para temperatura de entrada do gás igual a temperatura da chama e números de Reynolds iguais a 3 (Fig. 4.13) e 30 (Fig. 4.14). O modelo de Walker, Geyling e Nagel não considera os termos de condução e termoforésia axial, além de desprezar também a difusão axial e radial e considerar o escoamento hidrodinamicamente desenvolvidos na entrada do tubo. Os resultados foram obtidos numericamente, também utilizando o método de diferenças finitas.

Figura 4.13: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial.
 Comparação com resultados da literatura

Os resultados de Walker et al. foram obtidos considerando espessura nula na parede, a temperatura adimensional θ^* igual a 1, coeficiente termodifusivo $K = 0.9$ e número de Prandtl $Pr = 0.7$, valores estes iguais aos utilizados no modelo aqui proposto nos resultados apresentados nas Figs. 4.13 e 4.14. A diferença entre os modelos, portanto, está básica-

Figura 4.14: Eficiência de Deposição em Função da Distância Axial.
 Comparação com resultados da literatura

mente na consideração dos termos axiais. Pode-se notar que os resultados obtidos pelo modelo proposto têm boa concordância com os resultados apresentados em [5]. É importante notar também que, para $\theta_0 = 1.0$, como já foi dito anteriormente, os termos axiais não têm forte influência nos valores da eficiência de deposição, especialmente para altos valores

de Re .

Walker, Geyling e Nagel [6] fornecem também resultados da eficiência de deposição em função da temperatura adimensional da parede (caracterizada por θ^*). Novamente são desprezados os termos axiais e os termos difusivos e o escoamento é considerado hidrodinamicamente desenvolvido. Os resultados de Walker et al. são apresentados na tabela abaixo. Estes valores foram obtidos para espessura nula de parede, $\theta_0 = 1.0$, $PrK = 0.63$ e são considerados válidos para qualquer valor de Re . Os resultados do modelo aqui proposto que são apresentados na tabela abaixo foram obtidos para espessura nula da parede, $\theta_0 = 1.0$, $Pr = 0.7$, $K = 0.9$ e $Re = 3$.

θ^*	E (L)	
	Modelo de Walker et al	Modelo proposto
1.0	0.36	0.39
1/3	0.61	0.65

Tabela 4.1: Eficiência Global em Função da Temperatura de Parede do Tubo

Novamente, a diferença entre os modelos reside na consideração dos termos axiais. O fato de se ter utilizado apenas os resultados para $Re = 3$ do nosso modelo não invalida a comparação, já que, como pode ser visto na Fig. 4.5, estes valores são praticamente invariantes com Re (para $Re \geq$

7 e $\theta^* = 1$, por exemplo, $E(L) \simeq 0.37$). Observando-se os valores da tabela acima, pode-se notar uma boa concordância entre os resultados.

Os resultados obtidos demonstrando a importância da termoforésia axial são aparentemente inéditos, o que impossibilita a sua comparação com qualquer outro resultado da literatura. Da mesma forma, não se conseguiu uma comparação dos resultados obtidos nos casos onde foi considerada uma espessura de parede do tubo.

A seguir são feitos alguns comentários sobre as trajetórias das partículas. Alguns destes resultados foram comparados qualitativamente com os resultados obtidos por Walker et al. [6] e Morse et al. [4] para temperatura de entrada do gás igual à temperatura da chama, apresentando também boa concordância.

IV.2 – Trajetórias e Isotermas

As trajetórias das partículas podem ser observadas nas Figs. 4.15 a 4.21.

Figura 4.15: Trajetórias das Partículas

Figura 4.16: Trajetórias das Partículas

Figura 4.17: Trajetórias das Partículas

Figura 4.18: Trajetórias das Partículas

Figura 4.19: Trajetórias das Partículas

Figura 4.20: Trajetórias das Partículas

Figura 4.21: Trajetórias das Partículas

Quando a termoforésia axial na região de entrada é desprezível (i.e., quando a temperatura de entrada do gás é igual a temperatura da chama ou $\theta_0 = 1.0$) pode-se perceber que todas as partículas injetadas no escoamento penetram no tubo. Na região da chama, estas partículas tendem a se mover para o centro do tubo, que é a direção oposta ao gradiente de temperatura. Após o término da chama, a direção do gradiente de temperatura radial se inverte e, conseqüentemente, as partículas passam a se movimentar na direção da parede, se depositando. É importante observar também que as partículas posicionadas em regiões próximas do centro do tubo tendem a sair do tubo junto com o gás. Isto ocorre devido aos fracos gradientes de temperatura na direção radial nestas regiões, insuficientes para movimentar as partículas na direção da parede.

Nas Figs. 4.15 e 4.16 foram plotadas as trajetórias das partículas para $Re = 3$ e $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 , respectivamente. Pela comparação destes gráficos pode-se observar claramente o efeito da termoforésia axial. Nota-se que, para $\theta_0 = 0.5$, algumas partículas (mais próximas à parede) se movimentam para fora do tubo, reduzindo bruscamente a eficiência de deposição. Este gradiente de temperatura na direção axial na região de entrada do tubo, que induz a força termoforética axial na direção contrária ao escoamento, pode ser observado na Fig. 4.22, onde foram plotadas as isotermas do escoamento, quando $Re = 3$ e $\theta_0 = 0.5$. Na Fig. 4.23 foram plotadas as isotermas para $Re = 3$ e $\theta_0 = 1.0$. Neste último caso os gradientes na região de entrada não ocorrem, explicando o fato de que todas as partículas penetram no tubo.

Aumentando-se o número de Reynolds o efeito da termoforésia axial é bem mais fraco. Na Fig. 4.24, onde foram plotadas as isotermas para $Re = 30$ e $\theta_0 = 0.5$ observa-se que os gradientes são bem mais fracos, o que também pode ser percebido na Fig. 4.18, onde foram plotadas as trajetórias das partículas para este mesmo caso. Na Fig. 4.25 foram

plotadas as isotermas para $Re = 30$ e $\theta_0 = 1.0$. Neste caso o gradiente de temperatura na entrada do tubo não ocorre. Além disso percebe-se que para $\theta_0 = 1.0$ os gradientes de temperatura na direção radial são mais fortes, fazendo com que mais partículas se depositem neste caso do que no caso em que $\theta_0 = 0.5$, o que pode ser observado pela comparação das Figs. 4.17 e 4.18.

Nas Figs. 4.19 e 4.20 foram plotadas as trajetórias para $Re = 3$ e $\theta_0 = 0.5$ desprezando-se os termos de condução e termoforésia axiais. Estas podem ser comparadas com o modelo proposto (Figs. 4.16 e 4.18), observando-se a forte influência destes termos nos resultados finais. Percebe-se também que para baixos números de Reynolds o efeito dos termos axiais é bem mais pronunciado do que para altos números de Reynolds.

A influência da temperatura da parede nas trajetórias das partículas pode ser observada na Fig. 4.21, onde foram plotadas as trajetórias para $Re = 3$, $\theta_0 = 1.0$ e $\theta^* = 1/3$. Neste caso os gradientes de temperatura na direção radial são bem mais fortes do que no caso em que $\theta^* = 1.0$ (Fig. 4.15), fazendo com que as partículas se movimentem mais acentuadamente na direção da parede.

Figura 4.22: Isotermas

Figura 4.23: Isothermas

Figura 4.24: Isotermas

Figura 4.25: Isothermas

IV.3 – Perfis de Velocidade, Temperatura e Concentração

A seguir são apresentados alguns resultados de perfis de velocidades, temperatura e concentração obtidos com o modelo proposto.

IV.3.1 – Perfis de Velocidade

Os perfis de velocidade são apresentados nas Figs. 4.26 a 4.35.

Nas Figs. 4.26 e 4.27 são plotados os perfis da velocidade axial do escoamento para alguns valores da posição axial.

Figura 4.26: Perfis da Velocidade de Escoamento

Figura 4.27: Perfis da Velocidade de Escoamento

Pode-se observar que o desenvolvimento hidrodinâmico é atingido nos dois casos ($Re = 3$ e 30), sendo que para números de Reynolds mais baixos o desenvolvimento é atingido logo no início do tubo.

Nas Figs. 4.28 a 4.31 são plotados os perfis da velocidade axial termoforética para $Re = 3$ e 30 e $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 .

Figura 4.28: Perfis da Velocidade Axial Termoforética

Figura 4.29: Perfis da Velocidade Axial Termoforética

Figura 4.30: Perfis da Velocidade Axial Termoforética

Figura 4.31: Perfis da Velocidade Axial Termoforética

Pode-se perceber que para $\theta_0 = 1.0$ (Figs. 4.28 e 4.29) as velocidades termoforéticas axiais são sempre positivas, enquanto que para $\theta_0 = 0.5$ (Figs. 4.30 e 4.31) existem velocidades negativas na entrada do tubo. Para $Re = 30$ a maior velocidade negativa atingida ainda é menor, em módulo, do que a velocidade do escoamento. Neste caso então, nenhuma partícula sai do tubo pela região de entrada, o que concorda com as conclusões anteriores. Para $Re = 3$ existem pontos onde as velocidades termoforéticas são maiores em módulo e no sentido oposto ao da velocidade do escoamento, fazendo com que as partículas saiam do tubo por sua seção de entrada, como pode ser conferido com a Fig. 4.16. Para $Re = 30$ e $\theta_0 = 1.0$, a velocidade termoforética axial é desprezível em relação à velocidade axial do escoamento. Para $Re = 3$ e $\theta_0 = 1.0$ ela já é considerável em alguns valores da posição axial. Para $\theta_0 = 0.5$, a velocidade termoforética axial atinge valores bastante elevados na região de entrada do tubo, especialmente quando comparadas com baixas velocidades de escoamento.

Nas Figs. 4.32 a 4.35 são plotados perfis da velocidade termoforética na direção radial para $Re = 3$ e 30 e $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 , em diversas posições axiais.

Figura 4.32: Perfis da Velocidade Radial Termoforética

Figura 4.33: Perfis da Velocidade Radial Termoforética

Figura 4.34: Perfis da Velocidade Radial Termoforética

Figura 4.35: Perfis da Velocidade Radial Termoforética

Pode-se observar que na região da chama (i.e., até $x/R_i = 1.00$) as velocidades termoforéticas radiais são na mesma direção da velocidade radial do escoamento, i.e., apontam na direção do centro do tubo. Isto ocorre devido ao fato de que o gradiente de temperatura radial se dá na direção da parede. Para regiões próximas à região da chama e posteriores a ela, o sentido do gradiente se inverte ocasionando uma mudança também da direção da velocidade termoforética radial. Neste caso, as partículas se movem na direção da parede do tubo, já que a velocidade do escoamento na direção radial, embora aponte em sentido contrário, é bem mais baixa em módulo do que a velocidade termoforética radial, que então passa a ser predominante. Para posições mais distantes da chama ($x/R_i = 5.37$), a velocidade termoforética radial diminui. Para $Re = 3$, ela atinge o valor zero, já que neste ponto o gradiente de temperatura radial é nulo. Para $Re = 30$, como o gradiente de temperatura ainda não é nulo, a velocidade termoforética é baixa, porém não nula.

IV.3.2 – Perfis de Temperatura

Nas Figs. 4.36 a 4.39 são plotados os perfis de temperatura para $Re = 3$ e 30 e $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 .

Figura 4.36: Perfis de Temperatura

Figura 4.37: Perfis de Temperatura

Figura 4.38: Perfis de Temperatura

Figura 4.39: Perfis de Temperatura

Na região da chama (em $x/R_i = 0.44$) o gradiente de temperatura radial ocorre no sentido da parede. Este gradiente é muito suave para $\theta_0 = 1.0$ e se reduz ainda mais com o aumento do número de Reynolds. Neste caso, a velocidade radial das partículas é igual à do escoamento (i.e., em direção ao centro do tubo). Para $\theta_0 = 0.5$ o gradiente de temperaturas já é significativo. Dessa forma, a velocidade termoforética radial é adicionada a velocidade radial do escoamento. Porém, pela observação das Figs. 4.15 a 4.18 percebe-se que a intensidade do gradiente de temperatura provoca apenas uma pequena variação nas trajetórias desta região. Nota-se também que os termos axiais não podem ser desprezados nesta análise, como pode ser observado analisando-se também as Figs. 4.19 e 4.20.

Logo após a chama (em $x/R_i = 1.31$), o gradiente de temperaturas se inverte, além de ser mais intenso nos casos em que $\theta_0 = 1$, provocando então o movimento das partículas, pelo efeito da termoforésia, na direção da parede, fato que já foi observado nas Figs. 4.15 a 4.20. Para regiões mais a frente ($x/R_i = 5.37$), o gradiente de temperaturas se anula para $Re = 3$ e se torna bastante suave para $Re = 30$, fazendo com que as partículas voltem a se movimentar apenas junto com o escoamento.

IV.3.3 – Perfis de Concentração

Os perfis de concentração para $Re = 3$ e 30 e $\theta_0 = 1.0$ são plotados nas Figs. 4.40 e 4.41.

O decréscimo do valor médio de concentração de partículas no tubo com a distância axial indica a ocorrência da deposição das partículas. Para $Re = 30$, os valores obtidos para a concentração são sempre mais elevados do que para $Re = 3$, resultado este que concorda com a Fig. 4.7, que mostra a variação da eficiência de deposição com o número de Reynolds para $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 . Dessa forma, para $Re = 30$, mais partículas per-

Figura 4.40: Perfis de Concentração

Figura 4.41: Perfis de Concentração

manecem em suspensão no gás e são carregadas com o escoamento até a saída.

Nas Figs. 4.42 e 4.43 são plotados os perfis de concentração para $Re = 3$ e 30 e $\theta_0 = 0.5$.

Figura 4.42: Perfis de Concentração

Figura 4.43: Perfis de Concentração

Para $\theta_0 = 0.5$, observa-se que os valores da concentração são mais elevados quando $Re = 30$, confirmando mais uma vez os resultados da Fig. 4.7. Nota-se também que para $\theta_0 = 0.5$, ocorre um pequeno acúmulo de partículas no centro do tubo na região de entrada, devido justamente aos efeitos dos maiores gradientes de temperatura na direção radial, comentados no sub-ítem anterior.

Pode-se observar também que na região próxima à parede a concentração das partículas é mais elevada para $\theta_0 = 1.0$ do que para $\theta_0 = 0.5$.

IV.4 – Variação da Temperatura e Concentração Com a Distância Axial

Na Fig. 4.44 é plotada a variação da temperatura na direção axial para $\theta_0 = 1.0$ e $Re = 3$ e 30 , em $r/R_i = 0.31$.

Figura 4.44: Temperatura em Função da Distância Axial

Nota-se que para $Re = 3$ os gradientes são mais intensos no início do tubo mas se suavizam rapidamente, indicando um menor comprimento de deposição do que o obtido em $Re = 30$.

Figura 4.45: Concentração em Função da Distância Axial

Na Fig. 4.45, onde é plotada a concentração das partículas em função da distância axial, pode-se observar também este fato, pois para $Re = 3$ o valor da concentração atinge um valor mínimo, que é mantido constante daí em diante, antes do que para $Re = 30$.

Nas Figs. 4.46 e 4.47 pode-se observar que a concentração deixa de variar quando os valores da temperatura se mantêm praticamente constantes.

Figura 4.46: Temperatura e Concentração em Função da Distância Axial

Figura 4.47: Temperatura e Concentração em Função da Distância Axial

Na Fig. 4.48 é plotada a variação da temperatura na direção axial para $Re = 3$ e $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 , em $r/R_i = 0.96$, i.e, região bem próxima à parede.

Figura 4.48: Temperatura em Função da Distância Axial

Nota-se que os gradientes de temperatura na direção axial são bastante intensos numa pequena região envolvendo o fim da chama.

Na Fig. 4.49 são plotados os valores da concentração em função da distância axial, também para $Re = 3$ e $\theta_0 = 1.0$ e 0.5 , em $r/R_i = 0.96$.

Nota-se que na região da chama a concentração é nula para $\theta_0 = 0.5$, fato que pode ser explicado pela existência da termoforésia axial. Já para $\theta_0 = 1.0$, onde a termoforésia axial não é tão efetiva, a concentração se reduz bruscamente até atingir o valor nulo no fim da chama. Esta redução

Figura 4.49: Concentração em Função da Distância Axial

no valor da concentração ocorre devido ao afastamento das partículas da região da parede pelo efeito da termoforésia radial. Depois da chama, como as partículas passam a se movimentar na direção da parede, a concentração neste ponto tende a aumentar até atingir um valor limite, quando então permanece inalterada, indicando então que a deposição cessou.

CAPÍTULO V

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi analisada a deposição de partículas em um dos mais importantes processos de fabricação de pré-formas para a produção de fibras óticas: o Processo Modificado de Deposição de Vapor Químico (MCVD). Foi feita uma simulação numérica e utilizada a técnica de volumes finitos na solução das equações diferenciais que governam o problema: as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento linear, de energia e de massa de partículas. A equação de conservação de massa de partículas foi resolvida utilizando um campo de velocidades que não satisfazia a equação de conservação de massa do fluido. Este campo de velocidades foi obtido adicionando-se a velocidade termoforética, obtida a partir do conhecimento dos gradientes de temperatura locais, ao campo de velocidades do escoamento. Este, por sua vez, foi obtido através da solução acoplada das equações de conservação de massa do fluido e de quantidade de movimento linear e utilizado na solução da equação de conservação de energia, onde se determinou o campo de temperaturas do escoamento.

Todas as equações foram resolvidas na forma elíptica, a fim de que fosse analisado o efeito dos termos axiais de condução e termoforésia na eficiência de deposição das partículas. Nos trabalhos publicados na literatura esta análise não foi realizada, pois estes termos não são considerados.

Os resultados obtidos revelaram a dependência da eficiência global de deposição de partículas com a temperatura de entrada do gás, com a temperatura da parede do tubo, com o número de Reynolds e com a espessura da parede do tubo.

A influência da temperatura de entrada do gás na eficiência de de-

posição demonstrou ser bastante forte, especialmente para baixos valores de números de Reynolds. Este fato demonstra que para a obtenção de um valor satisfatório da eficiência de deposição do processo MCVD é necessária uma boa estimativa para os valores da temperatura do gás nas posições anteriores à tocha.

A dependência da eficiência global de deposição de partículas com os valores da temperatura da parede após a chama revela a necessidade de uma boa estimativa ou a determinação desta temperatura para que uma simulação mais realista seja alcançada.

A influência do número de Reynolds na eficiência de deposição mostrou ser dependente do valor da temperatura de entrada do gás: para temperatura de entrada do gás igual a temperatura da tocha, a eficiência global diminui com o número de Reynolds, enquanto que para temperaturas de entrada do gás menores do que a temperatura da tocha, a eficiência aumenta com o número de Reynolds. Este comportamento só pôde ser observado devido à consideração dos termos axiais.

A influência da espessura da parede na eficiência global de deposição demonstra que, para a análise do processo real, ela deve ser considerada. É importante notar que, no processo real, esta espessura aumenta à medida que as partículas vão se depositando, ao mesmo tempo que o raio interno diminui. Como foi observado na análise paramétrica, o parâmetro que influi no valor da eficiência é a razão entre a espessura da parede e o raio interno do tubo.

Foi verificada também a forte influência dos termos de condução e termoforésia axiais, através de uma comparação entre os resultados obtidos pelo modelo proposto e por um modelo onde estes termos não foram considerados. Esta influência mostrou ser muito mais marcante para números de Reynolds baixos, que são os mais utilizados nos processos reais.

Como foi visto, o modelo aqui desenvolvido apresentou algumas simplificações, tais como a consideração de temperatura uniforme na parede e de concentração uniforme na entrada do tubo. Isto sugere algumas propostas para trabalhos futuros. Uma sugestão seria a utilização de uma distribuição de temperaturas na parede do tubo, mais próximo ao que ocorre no processo real. Um outro trabalho interessante, e que já está em andamento, é a simulação do processo onde, ao invés de se considerar uma concentração de partículas uniforme na entrada, impõe-se uma distribuição de concentração de tetracloreto de silício ($SiCl_4$) e oxigênio (O_2) na entrada. Dessa forma, a reação que produz as partículas de dióxido de silício (SiO_2) é simulada na análise, dispensando a necessidade de estimar distribuições de partículas.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Optical Fiber Communications, 1985, Tingye Li ed., Academic Press inc., Orlando, vol.1
2. W.C.Hinds, 1982, *Aerosol Technology*, John Wiley & Sons
3. P.G.Simpkins, S.Greenberg-Kosinski e J.B.MacChesney, 1979, "Thermophoresis: The Mass Transfer Mechanism in Modified Chemical Vapor Deposition", *Journal of Applied Physics*, vol. 50, pg. 5676 a 5681
4. T.F.Morse, C.Y.Wang e J.W.Cippola, 1985, "Laser-Induced Thermophoresis and Particulate Deposition Efficiency", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 107, pg. 155 a 160
5. K.L.Walker, G.M.Homsy e F.T.Geyling, 1979, "Thermophoretic Deposition of Small Particles in Laminar Tube Flow", *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 69, pg. 138 a 147
6. K.L.Walker, F.T.Geyling e S.R.Nagel, 1980, "Thermophoretic Deposition of Small Particles in the Modified Chemical Vapor Deposition (MCVD) Process", *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 63, pg. 552 a 558
7. C.Y.Wang, T.F.Morse e J.W.Cippola, 1983, "Laser-Induced Natural Convection and Thermophoresis", *ASME Journal of Heat Transfer*, vol. 107, pg. 161 a 167
8. Jakob, 1949, *Heat Transfer*, vol. I, John Wiley & Sons, 10.ed.
9. L.Talbot, R.K.Cheng, R.W.Schefer e D.R.Willis, 1981, "Thermophoresis of Particles in a Heated Boundary Layer", *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 101, pg. 737 a 758
10. S.V.Patankar, 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Company, New York

BIBLIOGRAFIA

1. C.Y.Wang, T.F.Morse e J.W.Cippola, 1987, "Laser-Enhanced Thermophoresis in Vertical Tube Flow", *Convective Transport*, ASME HTD, vol. 82, pg. 9 a 14, Jaluria et al. ed.
2. V.K.Garg e S.Jayaraj, 1988, "Thermophoresis of Aerosol Particles in Laminar Flow over Inclined Plates", *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 31, pg. 875 a 890
3. N.A.Fuchs, 1964, *The Mechanics of Aerosols*, Pergamon Press
4. S.K.Friedlander, 1977, *Smoke, Dust and Haze*, John Wiley & Sons
5. H.L.Green e W.R.Lane, 1957, *Particulate Clouds: Dusts, Smokes and Mists*, E.&F.N.Spon Ltda
6. T.K.Sherwood, R.L.Pigford e C.R.Wilke, 1975, *Mass Transfer* McGraw-Hill Kogakusha