4 Método Numérico de Resolução

O método numérico utilizado para resolver as equações governantes e as equações auxiliares foi o método de volumes finitos (Patankar, 1980) com integração temporal totalmente implícita.

Na solução do problema de mudança de fase, a posição da interface é parte da solução, o que dificulta a solução das equações gerais. A nova posição da interface é determinada de acordo com os modelos descritos no Capítulo 3. Assume-se que o movimento do fluido dentro do canal não é influenciado fortemente pelo movimento da interface, de modo que para intervalos curtos, as equações de conservação são solucionadas com a interface fixa. A malha computacional é definida de forma a coincidir com a posição da interface, conseqüentemente a malha computacional é gerada para cada instante de tempo para o qual a interface muda de posição. Uma vez que o movimento da interface só ocorre na direção vertical, a malha na direção horizontal permanece constante. A malha é concentrada na interface devido aos altos gradientes de concentração.

A Figura 4.1 apresenta um volume de controle típico para o ponto nodal P. Os pontos nodais vizinhos, representados pelas letras maiúsculas N, S, E, W são os pontos norte, sul, leste e oeste, respectivamente. As faces dos volumes de controle, representadas pelas letras minúsculas, n, s, e, w, correspondem as linhas pontilhadas.



Figura 4.1: Esquema do volume de controle.

Próximo aos contornos, os volumes de controle possuem dimensão nula o que facilita a implementação das condições de contorno.

A discretização das equações de conservação pode ser obtida ao integrar no tempo e no volume de controle as equações fundamentais. Para a integração temporal considerou-se formulação totalmente implícita. Já para a integração espacial selecionou-se o método *Power-Law* de Patankar (1980). A seguir, detalhes da discretização são apresentados.

4.1. Equação de Conservação de Massa

Ao integrar a Eq. (3.57) de conservação de massa no tempo e no volume de controle obtém-se:

$$\begin{aligned} \left(Ja\,\rho_{m} - Ja^{o}\,\rho_{m}^{o}\right)_{p} \frac{\Delta\xi\,\Delta\eta}{\Delta\tau} + \\ + \left(\rho_{m}\,h_{\eta}\,\widetilde{U}\right)_{e}\Delta\eta - \left(\rho_{m}\,h_{\eta}\,\widetilde{U}\right)_{w}\Delta\eta + \\ + \left(\rho_{m}\,h_{\xi}\,\widetilde{V}\right)_{n}\Delta\xi - \left(\rho_{m}\,h_{\xi}\,\widetilde{V}\right)_{s}\Delta\xi = 0 \end{aligned}$$

$$(4.1)$$

onde os subscritos em letras minúsculas indicam que os termos são avaliados nas faces do volume de controle. O índice superior indica valores conhecidos no instante de tempo τ , e os termos sem índice são avaliados no instante de tempo futuro $\tau + \Delta \tau$.

Os fluxos de massa através das faces do volume de controle são representados a seguir:

$$F_e = \left(\rho_m \ h_\eta \ \widetilde{U}\right)_e \ \Delta\eta \qquad ; \qquad F_w = \left(\rho_m \ h_\eta \ \widetilde{U}\right)_w \ \Delta\eta \qquad (4.2)$$

$$F_n = \left(\rho_m \ h_{\xi} \ \widetilde{V}\right)_n \ \Delta\xi \qquad ; \qquad F_s = \left(\rho_m \ h_{\xi} \ \widetilde{V}\right)_s \ \Delta\xi \qquad (4.3)$$

Reescrevendo a Eq. (4.1) temos:

$$\rho_{mp} \frac{Ja_p \ \Delta\xi \ \Delta\eta}{\Delta\tau} = \rho_{mp}^{\ o} \frac{Ja_p^o \ \Delta\xi \ \Delta\eta}{\Delta\tau} - F_e + F_w - F_n + F_s = 0 \tag{4.4}$$

4.2. Equação de Conservação de uma Grandeza Escalar

A equação de conservação de uma grandeza escalar pode ser a equação de energia, de concentração da mistura óleo parafina, de concentração da parafina sólida fora da solução, energia cinética turbulenta e dissipação da energia cinética turbulenta.

A equação genérica que representa as equações de conservação de uma grandeza escalar, escrita em coordenadas curvilíneas, é apresentada a seguir.

$$\frac{\partial (Ja \ \rho \ \phi)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\rho \ \phi \ h_{\eta} \ \widetilde{U} - \alpha_{\xi} \ \frac{\Gamma}{h_{\xi}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \beta_{\xi} \ \frac{\Gamma}{h_{\eta}} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) + \\
+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\rho \ \phi \ h_{\xi} \ \widetilde{V} - \alpha_{\eta} \ \frac{\Gamma}{h_{\eta}} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + \beta_{\eta} \ \frac{\Gamma}{h_{\xi}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) = S \ Ja$$
(4.5)

onde ϕ é a variável dependente, ρ e Γ são a massa específica e o coeficiente de difusão associado a ϕ . \tilde{U} e \tilde{V} são os componentes contravariantes do vetor velocidade relativo nas direções ξ e η , respectivamente. *S* é o termo de fonte referente a ϕ .

Por conveniência dividiremos em duas parcelas o termo de fluxo total, uma denominada de parcela principal que é composta de uma parcela convectiva e outra difusiva, enquanto o outro termo, de fluxo secundário formado por uma parcela só difusiva, presente só quando a malha é não ortogonal.

$$J_{\xi} = J_{\xi p} - J_{\xi s} \qquad ; \qquad J_{\eta} = J_{\eta p} - J_{\eta s} \qquad (4.6)$$

$$J_{\xi p} = \rho \phi h_{\eta} \tilde{U} - \alpha_{\xi} \frac{\Gamma}{h_{\xi}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \quad ; \qquad J_{\xi s} = -\beta_{\xi} \frac{\Gamma}{h_{\eta}} \frac{\partial \phi}{\partial \eta}$$
(4.7)

$$J_{\eta p} = \rho \phi h_{\xi} \tilde{V} - \alpha_{\eta} \frac{\Gamma}{h_{\eta}} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \quad ; \qquad J_{\eta s} = -\beta_{\eta} \frac{\Gamma}{h_{\xi}} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}$$
(4.8)

O termo fonte *S* conforme Patankar (1980) pode ser linearizado da seguinte maneira:

$$S = S_C + S_P \phi_p \qquad ; \quad S_P \le 0 \tag{4.9}$$

De acordo com Patankar (1980), a restrição de S_P deve ser respeitada para evitar problemas de convergência.

A equação de conservação, Eq. (4.5) pode ser escrita como

$$\frac{\partial (Ja \ \rho \ \phi)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} (J_{\xi p} - J_{\xi s}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (J_{\eta p} - J_{\eta s}) =$$

$$= (S_{c} + S_{p} \ \phi) Ja$$
(4.10)

Integrando no espaço e no tempo de forma totalmente implícita, assumindo fluxos principais constantes através das faces do volume de controle, e considerando o termo transiente e de fonte constantes no volume de controle, tem-se:

$$(Ja \ \rho \ \phi - Ja^{\circ} \ \rho^{\circ} \ \phi^{\circ})_{p} \frac{\Delta \xi \ \Delta \eta}{\Delta \tau} + + (J_{p,e} - J_{s,e}) - (J_{p,w} - J_{s,w}) + + (J_{p,n} - J_{s,n}) - (J_{p,s} - J_{s,s}) = (S_{C} + S_{P} \ \phi_{P}) Ja \ \Delta \xi \ \Delta \eta$$

$$(4.11)$$

onde os fluxos nas faces são:

$$J_{p,e} = J_{\xi p_e} \Delta \eta \qquad ; \qquad J_{s,e} = J_{\xi s_e} \Delta \eta \qquad (4.12)$$

$$J_{p,w} = J_{\xi p_w} \Delta \eta \qquad ; \qquad J_{s,w} = J_{\xi s_w} \Delta \eta \qquad (4.13)$$

$$J_{p,n} = J_{\eta p_n} \Delta \xi \qquad ; \qquad J_{s,n} = J_{\eta s_n} \Delta \xi \qquad (4.14)$$

$$J_{p,s} = J_{\eta p_s} \Delta \xi \qquad ; \qquad J_{s,s} = J_{\eta s_s} \Delta \xi \qquad (4.15)$$

Multiplicando a equação discretizada da conservação de massa, Eq. (4.4) por ϕ_P e subtraindo da equação geral de conservação, Eq. (4.11) temos:

$$\rho_{P}^{o} \frac{Ja_{P}^{o} \Delta\xi \Delta\eta}{\Delta\tau} \phi_{P} + (J_{p,e} - F_{e} \phi_{P}) - (J_{p,w} - F_{w} \phi_{P}) + (J_{p,n} - F_{n} \phi_{P}) - (J_{p,s} - F_{s} \phi_{P}) = \hat{b}_{s} + b_{no}$$
(4.16)

onde os termos de fonte \hat{b}_s e b_{no} são:

$$\hat{b}_{s} = \left[\left(S_{C} + S_{P} \phi_{p} \right) J a_{P} + \rho_{P}^{o} \frac{J a_{P}^{o} \Delta \xi \Delta \eta}{\Delta \tau} \phi_{P}^{o} \right] \Delta \xi \Delta \eta$$
(4.17)

$$b_{no} = J_{s,e} - J_{s,w} + J_{s,n} - J_{s,s}$$
(4.18)

O termo b_{no} possui apenas os fluxos secundários devido a não ortogonalidade da malha. Estes termos são tratados explicitamente para não acarretar instabilidade numérica, e simplificar o algoritmo de solução do sistema algébrico. Caso a malha apresente pouca não ortogonalidade este termo será pequeno.

O fluxo principal, da variável dependente de interesse, nas faces do volume de controle, pode ser avaliado em função das variáveis armazenadas nos nós vizinhos às faces, de acordo com:

$$J_{p,e} - F_e \phi_P = a_E (\phi_P - \phi_E) \; ; \; J_{p,w} - F_w \phi_P = a_W (\phi_W - \phi_P) \tag{4.19}$$

$$J_{p,n} - F_n \phi_P = a_N (\phi_P - \phi_N) \quad ; \quad J_{p,s} - F_s \phi_P = a_S (\phi_S - \phi_P) \tag{4.20}$$

onde a_E , a_W , a_N e a_S são os coeficientes da discretização e dependem do esquema de interpolação a ser utilizado. Substituindo as Eqs. (4.19) e (4.20) na equação (4.16) e rearrumando, obtém-se

$$a_{P}\phi_{P} = a_{N}\phi_{N} + a_{S}\phi_{S} + a_{E}\phi_{E} + a_{W}\phi_{W} + b$$
(4.21)

onde

$$a_P = a_P^o + a_N + a_S + a_E + a_W - S_{PP} J a_P \Delta \xi \Delta \eta$$
(4.22)

$$b = S_{CP} Ja_P \Delta \xi \Delta \eta + b_{no} + a_P^o \phi_P^o$$
(4.23)

$$a_P^o = \rho_P^o \frac{J a_P^o \ \Delta \xi \ \Delta \eta}{\Delta \tau} \tag{4.24}$$

4.2.1. Esquema de interpolação

A fim de completar a discretização das equações de conservação, é necessário avaliar os termos a_E , a_W , a_N e a_S na Eq. (4.21). Estes termos apresentam a influência convectiva e difusiva do fluxo principal nas quatro faces do volume de controle. De acordo com o esquema de interpolação *Power-Law* (Patankar, 1980) os coeficientes da equação discretizada são

$$a_{E} = D_{e}A(|P_{e}|) + ||-F_{e},0|| \qquad a_{W} = D_{W}A(|P_{W}|) + ||F_{W},0|| \qquad (4.25)$$

$$a_{N} = D_{n}A(|P_{n}|) + ||-F_{n}0|| \qquad a_{S} = D_{S}A(|P_{S}|) + ||F_{S}0|| \qquad (4.26)$$

onde o operador ||A, B|| fornece o maior valor entre A e B, e A(|P|) é

$$A(|P|) = \left\| 0, (1-0,1|P|)^{5} \right\|$$
(4.27)

sendo P o número de Peclet de malha avaliado nas faces do volume de controle como

$$P_{e} = \frac{F_{e}}{D_{e}}$$
; $P_{w} = \frac{F_{w}}{D_{w}}$; $P_{n} = \frac{F_{n}}{D_{n}}$; $P_{s} = \frac{F_{s}}{D_{s}}$ (4.28)

Os fluxos de massa F que atravessam as faces do volume de controle, já foram descritos nas Eqs. (4.2) e (4.3). As condutâncias de difusão D são dadas por

$$D_{e} = \frac{\Gamma_{e} \ \alpha_{\xi e} \ \Delta \eta}{\left(\delta \xi\right)_{e}} \qquad ; \qquad D_{w} = \frac{\Gamma_{w} \ \alpha_{\xi w} \ \Delta \eta}{\left(\delta \xi\right)_{w}}$$
(4.29)

$$D_n = \frac{\Gamma_n \,\alpha_{\eta n} \,\Delta\xi}{\left(\delta\eta\right)_n} \qquad \qquad ; \qquad \qquad D_s = \frac{\Gamma_s \,\alpha_{\eta s} \,\Delta\xi}{\left(\delta\eta\right)_s} \tag{4.30}$$

Os termos $\delta\eta$ e $\delta\xi$ representam a diferença entre as coordenadas η e ξ entre dois pontos nodais de dois volumes de controle adjacentes e, Γ é o coeficiente difusivo. Os coeficientes α_{ξ} e α_{η} são parâmetros geométricos definidos pelas Eqs. (3.63) e (3.64).

Os fluxos secundários são discretizados linearmente. Por exemplo, para a face leste, o fluxo $J_{\xi s,e}$ é obtido por

$$J_{\xi_{s,e}} = -\beta_{\xi_{e}} \Delta \eta \left[\frac{J_{\xi_{s,e}}^{+} h_{\xi_{w}} + J_{\xi_{s,e}}^{-} h_{\xi_{e}}}{h_{\xi_{w}} + h_{\xi_{e}}} \right]$$
(4.31)

$$J_{\xi s,e}^{+} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Gamma_{ne,e}}{h_{\eta_{ne,e}}} \frac{\left(\phi_{NE} - \phi_{E}\right)}{\delta_{\eta_{ne,e}}} + \frac{\Gamma_{e,se}}{h_{\eta_{e,se}}} \frac{\left(\phi_{E} - \phi_{SE}\right)}{\delta_{\eta_{e,se}}} \right]$$
(4.32)

$$J_{\xi s,e}^{-} = \frac{1}{2} \left[\frac{\Gamma_e}{h_{\eta_e}} \frac{(\phi_N - \phi_P)}{\delta_{\eta_e}} + \frac{\Gamma_s}{h_{\eta_s}} \frac{(\phi_P - \phi_s)}{\delta_{\eta_s}} \right]$$
(4.33)

4.3. Equação de Conservação de Quantidade de Movimento Linear

A equação conservação de quantidade de movimento linear é uma equação vetorial, portanto é necessário resolver uma equação para cada componente do vetor velocidade. Os componentes de velocidade escolhidos são os componentes contravariantes $\vec{V} = U \vec{e}_{\xi} + V \vec{e}_{\eta}$. De acordo com Pires e Nieckele (1994), a escolha dos componentes contravariantes é conveniente, pois estes componentes aparecem naturalmente na equação de conservação. Além disso, apesar de introduzir termos de curvatura, Pires e Nieckele (1994) utilizam um procedimento relativamente simples para avaliar estes termos. O presente trabalho foi desenvolvido a partir do código numérico desenvolvido por Pires e Nieckele (1994) e Rocha (2000), conseqüentemente utiliza os componentes contravariantes como variáveis dependentes nas equações de conservação de quantidade de movimento linear.

Para evitar soluções com oscilação e seguindo a recomendação de Patankar (1980), armazena-se os componentes de velocidade deslocados em relação aos pontos nodais, local de armazenagem das grandezas escalares. O componente U_e é armazenado no centro da face e, enquanto que o componente V_n é armazenado no centro da face n. A Fig 4.2 apresenta um esquema dos componentes

contravariantes da velocidade U, armazenados nas faces dos volumes de controle.



Figura 4.2: Esquema dos componentes contravariantes e das pseudo-velocidades alinhadas na face *e*.

A equação de conservação da quantidade de movimento linear é apresentada a seguir

$$a_{e} U_{e} = a_{ee} U_{ee} + a_{w} U_{w} + a_{ne} U_{ne} + a_{se} U_{se} + A_{n_{e}} (p_{P} - p_{E}) + A'_{n_{e}} \Delta p)_{u,NO} + b'_{u_{e}} + B_{u_{e}}$$
(4.34)

onde

$$B_{u_e} = a_{ee} \left(U'_{ee} - U_{ee} \right) + a_w \left(U'_w - U_w \right) + a_{ne} \left(U'_{ne} - U_{ne} \right) + a_{se} \left(U'_{se} - U_{se} \right)$$
(4.35)

$$b_{u_e}' = \left[b_{u_e} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right]_e - b_{v_e} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big]_e \left[\frac{1}{h_{\eta_e}} \right]$$
(4.36)

$$\Delta p \Big)_{u,NO} = \left[\frac{p_{NE} - p_{SE}}{\delta_{\eta_{ne,e}} + \delta_{\eta_{e,Se}}} h_{\xi_w} + \frac{p_N - p_S}{\delta_{\eta_n} + \delta_{\eta_s}} h_{\xi_e} \right] \frac{\Delta \eta}{h_{\xi_w} + h_{\xi_e}}$$
(4.37)

$$A_{\eta_e} = h_{\eta_e} \Delta \eta \qquad \qquad A'_{\eta_e} = \left(\vec{e}_{\xi} \bullet \vec{e}_{\eta}\right) h_{\xi_e} \Delta \xi \qquad (4.38)$$

O termo de fonte B_{u_e} corresponde aos termos de curvatura da equação de

conservação de quantidade de movimento linear associada aos componentes contravariantes. A Fig 4.2 apresenta os componentes de velocidade, U' sendo componentes paralelos da velocidade \underline{U} avaliado na face e, definidos de acordo com

$$U_{ee} = \left[u_{ee} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right]_{e} - v_{ee} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big]_{e} \frac{1}{h_{\eta e}}; \qquad (4.39)$$

$$U_{w}^{'} = \left[u_{w}\frac{\partial x}{\partial \eta}\right]_{e} - v_{w}\frac{\partial x}{\partial \eta}\Big]_{e}\left]\frac{1}{h_{\eta e}}$$
(4.40)

$$U_{ne} = \left[u_{ne} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right]_{e} - v_{ne} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big]_{e} \frac{1}{h_{\eta e}}$$
(4.41)

$$U_{se}^{'} = \left[u_{se}\frac{\partial x}{\partial \eta}\right]_{e} - v_{se}\frac{\partial x}{\partial \eta}\right]_{e} \left[\frac{1}{h_{\eta e}}\right]$$
(4.42)

Para a obtenção das pseudo velocidades U' são necessários os termos cartesianos, Eq. (3.56), os quais são obtidos da seguinte forma

$$u = \frac{1}{Ja} \left(U h_{\eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} + V h_{\xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right); \quad v = \frac{1}{Ja} \left(U h_{\eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} + V h_{\xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)$$
(4.43)

Para o componente V_n

$$a_{n} V_{n} = a_{ne} V_{ne} + a_{nw} V_{nw} + a_{nn} V_{nn} + a_{s} V_{s} + A_{\xi_{n}} (p_{P} - p_{N}) + A'_{\xi_{n}} \Delta p)_{\nu,NO} + b'_{\nu_{n}} + B_{\nu_{nm}}$$

$$(4.44)$$

onde

$$B_{\nu_{\eta\eta}} = a_{ne} (V_{ne}' - V_{ne}) + a_{w} (V_{nw}' - V_{nw}) + a_{nn} (V_{nn}' - V_{nn}) + a_{s} (V_{s}' - V_{s})$$
(4.45)

$$b_{v_n}' = \left[-b_{u_n} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right]_e - b_{v_n} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right]_n \left[\frac{1}{h_{\xi_n}} \right]$$
(4.46)

$$\Delta p \Big)_{\nu,NO} = \left[\frac{p_{NE} - p_{NW}}{\delta_{\xi_{ne,n}} + \delta_{\xi_{n,nW}}} h_{\eta_s} + \frac{p_E - p_W}{\delta_{\xi_e} + \delta_{\xi_W}} h_{\eta_n} \right] \frac{\Delta \xi}{h_{\eta_s} + h_{\eta_n}}$$
(4.47)

$$A_{\xi_n} = h_{\xi_n} \Delta \xi \qquad \qquad A'_{\xi_n} = \left(\vec{e}_{\xi} \bullet \vec{e}_{\eta}\right) h_{\eta_n} \Delta \eta \qquad (4.48)$$

4.4. Acoplamento Velocidade - Pressão

Como a pressão não aparece explicitamente na equação da continuidade, algoritmos para a determinação da pressão são obtidos manipulando as equações de conservação de quantidade de movimento linear e a equação de conservação da massa.

O algoritmo SIMPLEC de Van Doormaal e Raithby (1984) foi selecionado para ser usado na solução do acoplamento pressão velocidade para escoamentos de fluidos incompressíveis. A escolha do método é devido a fato de que o mesmo apresenta uma boa convergência e simplicidade, quando comparado com os outros métodos disponíveis na literatura.

Para um dado campo de pressão, p^* , obtém-se, através da resolução das equações de conservação da quantidade de movimento linear, um campo estimado de velocidades, $U^* \in V^*$.

$$a_{e}U_{e}^{*} = \sum a_{nb}U_{nb}^{*} + A_{\eta_{e}}(p_{P}^{*} - p_{E}^{*}) + A_{\eta_{e}}(\Delta p^{*})_{u,NO} + b_{u_{e}}' + B_{u\xi_{e}}$$

$$(4.49)$$

$$a_{n} V_{n}^{*} = \sum a_{nb} V_{nb}^{*} + A_{\xi_{n}} \left(p_{P}^{*} - p_{N}^{*} \right) + A_{\xi_{n}} \Delta p^{*} \right)_{\nu,NO} + b_{\nu_{n}}' + B_{\nu_{mn}}$$

$$(4.50)$$

Como os valores de U^* e V^* são calculados a partir da estimativa do campo de pressão, estes não satisfazem a equação de continuidade. Somente um campo

de pressão correto produzirá um campo de velocidade que satisfaça a equação de conservação de massa.

As correções dos valores das velocidades e da pressão são:

$$U=U^*+U'$$
; $V=V^*+V'$; $p=p^*+p'$ (4.51)

onde $U' \in V'$ são as correções da velocidade e p' é a correção da pressão.

Após manipulação dos termos das equações de quantidade de movimento; obtém-se as seguintes fórmulas de correção dos componentes da velocidade:

$$U_{e} = U_{e}^{*} + d_{e} (p_{P}^{\prime} - p_{E}^{\prime}) + d_{e}^{\prime} \Delta p^{\prime})_{u,NO}$$
(4.52)

$$V_{n} = V_{n}^{*} + d_{n} \left(p_{P}' - p_{N}' \right) + d_{n}' \Delta p' \right)_{\nu, NO}$$
(4.53)

onde

$$d_e = \frac{A_{\eta_e}}{a_e - \sum a_{nb}} \qquad ; \qquad d_n = \frac{A_{\xi_n}}{a_n - \sum a_{nb}} \qquad (4.54)$$

$$d'_{e} = \frac{A'_{\eta_{e}}}{a_{e} - \sum a_{nb}} \qquad ; \qquad d'_{n} = \frac{A'_{\xi_{n}}}{a_{n} - \sum a_{nb}} \qquad (4.55)$$

A equação resultante para a correção de pressão pode ser obtida ao substituir as fórmulas de correção de velocidade na equação de conservação de massa, resultando em

$$a_{P}p'_{P} = a_{N}p'_{N} + a_{S}p'_{S} + a_{E}p'_{E} + a_{W}p'_{W} + b_{p'} + b_{p'NO}$$
(4.56)

onde

$$a_E = \rho_e d_e \Delta \xi \qquad ; \qquad a_W = \rho_w d_w \Delta \xi \qquad (4.57)$$

$$a_N = \rho_n d_n \Delta \eta$$
 ; $a_S = \rho_s d_s \Delta \eta$ (4.58)

$$a_P = a_N + a_S + a_E + a_W (4.59)$$

$$b_{P'} = \rho_s V_s^* \Delta \xi - \rho_n V_n^* \Delta \xi + \rho_w U_w^* \Delta \eta - \rho_e U_e^* \Delta \eta$$
(4.60)

Uma vez obtendo um campo de velocidade correto, o termo fonte de correção $b_{P'}$ é zero, e a correção de pressão será nula.

4.5. Esquema de Tratamento na Interface

Neste caso a temperatura da interface é obtida diretamente a partir da solução da equação de energia. Para que exista deposição de parafina a temperatura da interface sólido líquido deve ser menor que a TIAC. O valor da concentração na interface é avaliado pela curva de solubilidade da parafina, dada pela Eq. (3.2). O avanço da interface é obtida pela combinação dos mecanismos de difusão molecular e browniana, os quais são determinados em função dos gradientes de concentração das mistura óleo parafina e do gradiente de concentração da parafina sólida fora da solução, ambos gradientes avaliados na interface sólido líquido.

$$\delta = \delta^{o} + \left[\frac{-D_{m}}{(1-\phi^{*})} \frac{\rho_{m}}{\rho_{s}} \left(\frac{h_{\xi}}{Ja} \frac{\partial \omega_{m}}{\partial \eta} - \frac{\beta_{\xi}}{h_{\eta}h_{\xi}} \frac{\partial \omega_{m}}{\partial \xi} \right)_{int} + \frac{-D_{b}}{(1-\phi^{*})} \frac{\rho_{s}}{\rho_{s}} \left(\frac{h_{\xi}}{Ja} \frac{\partial \omega_{p}}{\partial \eta} - \frac{\beta_{\xi}}{h_{\eta}h_{\xi}} \frac{\partial \omega_{p}}{\partial \xi} \right)_{int} \right] \Delta t$$

$$(4.61)$$

4.6. Esquema de Solução do Sistema Algébrico

A solução do sistema algébrico após a discretização das equações foi obtida pelo algoritmo TDMA linha por linha recomendado por Patankar (1981). Este é um algoritmo iterativo que resolve o sistema de equações algébricas para situações multidimensionais. O procedimento de solução é realizado para as linhas horizontais, de cima para baixo e vice-versa, e para as linhas verticais na direção da esquerda para a direita e vice-versa. Adicionalmente para acelerar o processo de convergência, utilizou-se um algoritmo de correção por blocos (Settari e Aziz, 1973), o qual transfere mais rapidamente as informações dos contornos para o interior do domínio.

4.6.1. Critério de convergência

O critério de convergência utilizado para as equações de conservação de quantidade de movimento linear, de energia, da concentração da mistura óleo parafina, da concentração da parafina sólida fora da solução, da energia cinética turbulenta, da taxa de dissipação de energia cinética e para a equação da correção de pressão; é baseado na soma de todos os resíduos absolutos. Considera-se a solução convergida quando todos os resíduos são inferiores a uma tolerância *tol* especificada como sendo igual 10^{-6} .

$$R = \sum_{P} \left| a_{E} \phi_{E} + a_{W} \phi_{W} + a_{N} \phi_{N} + a_{S} \phi_{S} + b - a_{P} \phi_{P} \right|$$
(4.62)

$$R \le tol \tag{4.63}$$

Adicionalmente, a fonte de massa da equação de p', Eq. (4.56), também deve atender a um critério de convergência

$$b_{p'} \le tol$$
 (4.64)

4.7. Procedimento da Solução

A condição inicial do experimento é de fluido quente, i.e., temperatura uniforme na entrada acima da temperatura inicial de aparecimento de cristais de parafina (TIAC), escoando na seção de teste, juntamente com a água na mesma temperatura escoando pelos canais da parede de cobre. Para a obtenção da condição inicial para a solução numérica, determinou-se numericamente, o campo de velocidade, pressão, temperatura e concentrações, para esta condição.

Uma vez obtida a condição de regime permanente, a temperatura da água escoando nos canais da parede de cobre foi resfriada.

Para as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, concentração da mistura óleo parafina e concentração da parafina sólida fora da solução, o domínio computacional considerado é o da região líquida, somente a equação de conservação de energia é resolvida em todo o domínio, ou seja, na região líquida e na região sólida.

Após a convergência de todas as equações de conservação, verifica-se se existe algum ponto da interface a uma temperatura abaixo da TIAC, condição necessária para ligar o mecanismo de deposição. Neste caso, calcula-se a nova posição da interface de maneira totalmente implícita. A seguir resolve-se as equações de conservação novamente até convergir, repete-se este procedimento até que a convergência das equações de conservação ocorra na primeira iteração, indicando que a posição da interface corresponde ao instante de tempo analisado.

Utilizou-se um intervalo de tempo variado entre 10⁻³ e 10⁻¹ minutos, conforme a solução vai convergindo, de forma a acelerar o processo de convergência

De acordo com Leiroz (2004), o regime permanente era obtido após no máximo 4 horas de corrida experimental. No presente trabalho, considerou-se que o regime permanente foi obtido após 5 horas do início do resfriamento do canal, quando diferenças insignificantes eram observadas entre perfis de depósito de dois instantes de tempo consecutivos, e a temperatura da interface era maior ou igual da TIAC.