

4 Modelagem Numérica

Para se obter a solução numérica das equações diferenciais que regem o processo de absorção de CO₂, desenvolvido no capítulo anterior, estas precisam ser transformadas em sistemas de equações algébricas por meio da técnica de diferenças finitas.

Na resolução do sistema de equações algébricas obtidas das EDP's foi utilizado o algoritmo de Thomas ou TDMA (*TriDiagonal Matrix Algorithm*). Para solução das EDO's foi utilizado o método explícito de Euler e o método implícito de trapézio. A seguir temos a técnica de discretização e os métodos de resolução utilizados.

4.1 Método das Diferenças Finitas

O método das diferenças finitas é um método que permite a resolução de equações diferenciais, e se baseia na aproximação de derivadas por diferenças finitas em intervalos finitos. A fórmula de aproximação obtém-se da série de Taylor da função derivada. O primeiro passo para a aplicação do método consiste em definir a região para o qual se deseja resolver as equações de conservação na malha. Por conveniência, esta malha foi considerada quadrada. Os pontos da malha estão separados de uma distância h em ambas as direções x e z .

Na Figura 4.1 é apresentado um esquema da malha utilizada, para discretizar as EDP's e as EDO's que governam o problema. Um ponto principal e seus vizinhos são ilustrados na figura. Utilizando-se diferenças regressivas para as primeiras derivadas e diferenças centrais para as segundas derivadas, obtém-se as seguintes equações discretizadas na região do líquido.

A equação de transferência de energia é discretizada em:

$$\beta T_{i,j} - \beta_1 T_{i-1,j} - \beta_1 T_{i+1,j} = T_{i,j-1}^* \quad (4.1)$$

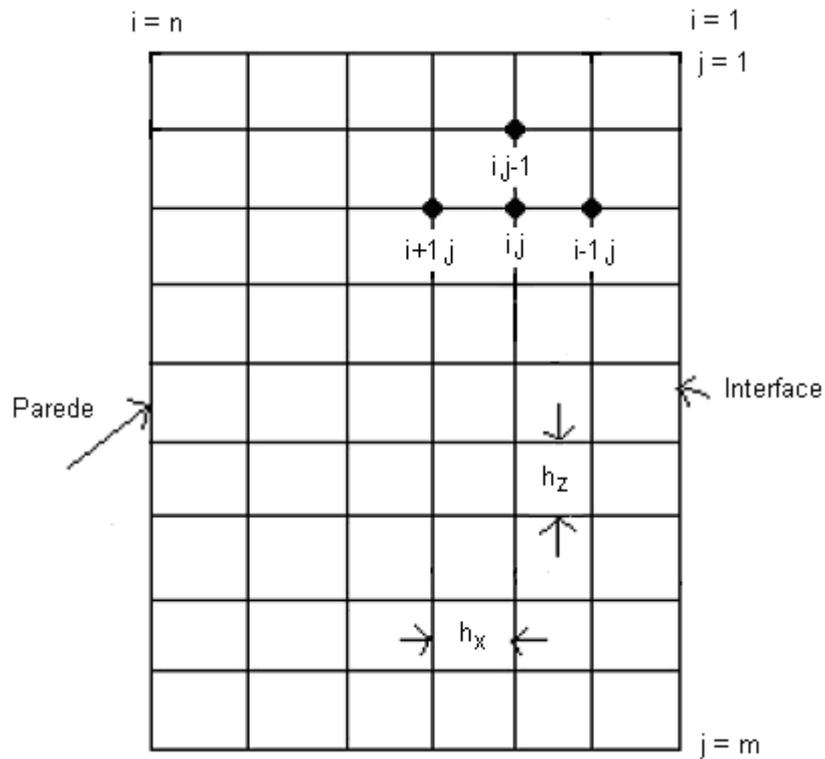


Figura 4.1- Discretização do domínio através de quatro pontos

onde

$$T_{i,j-1}^* = T_{i,j-1} + \left(\frac{\Delta H_R}{\rho C_{PL}} \right) \frac{h_z}{w_L} k C_A C_B \quad (4.2)$$

$$\beta_1 = \frac{\alpha h_z}{h_x^2 w_L} \quad (4.3)$$

$$\beta = 1 + 2\beta_1 \quad (4.4)$$

A equação de transferência de massa para o componente A é discretizada em:

$$\theta C_{A,j} - \theta_1 C_{A-1,j} - \theta_1 C_{A+1,j} = C_{A,j-1} \quad (4.5)$$

onde

$$\theta_1 = \frac{h_z D_A}{h_x^2 w_L} \quad (4.6)$$

$$\theta = 1 + 2\theta_1 + \frac{h_z k C_{B_i,j}}{w_L} \quad (4.7)$$

A equação de transferência de massa para o componente B é discretizada em:

$$\phi C_{B_{i,j}} - \phi_1 C_{B_{i-1,j}} - \phi_1 C_{B_{i,j-1}} = C_{B_{i,j-1}} \quad (4.8)$$

onde

$$\phi_1 = \frac{h_z D_B}{h_x^2 w_L} \quad (4.9)$$

$$\phi = 1 + 2\phi_1 + \frac{h_z k b C_{A_i,j}}{w_L} \quad (4.10)$$

4.2 Método de Euler e de Trapézio

O processo de resolução do sistema de equações não-lineares utilizou-se o método explícito de Euler como predição, e a forma implícita de trapézio para fazer a correção. Estes métodos foram usados para resolver as EDO's da região do gás, fornecendo as seguintes expressões.

A equação preditora (método explícito) expressada em termos da concentração é:

$$C_{AG_{j+1}} = C_{A_j} + h_x F(C_{AG_j}, z_j) \quad (4.11)$$

A equação corretora (método implícito) expressada em termos da concentração é:

$$C_{AG_{j+1}} = C_{A_j} + \frac{h_x}{2} \left[F(C_{AG_j}, z_j) + F(C_{AG_{j+1}}, z_{j+1}) \right] \quad (4.12)$$

4.3 Solução do Sistema Algébrico

Na região do líquido, o método utilizado para resolver as matrizes com três diagonais adjacentes, oriundas da discretização por diferenças finitas, foi o TDMA.

Um caso particular, muito comum de sistemas lineares, $Ax = b$, é o sistema tri-diagonal que pode ser representado da forma:

$$a_i x_{i-1} + d_i x_i + c_i x_{i+1} = b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

onde a é a sub-diagonal, d é a diagonal e c é a super-diagonal da matriz A , com os elementos $a_1 = 0$ e $c_n = 0$. A solução deste sistema pelo método de Thomas tem a forma:

$$x_N = q_N$$

$$x_{j-1} = q_{j-1} - p_{j-1} x_j, \quad j = n, n-1, \dots, 3, 2$$

onde

$$p_j = \frac{c_j}{d_j - a_j p_{j-1}} \quad \text{e} \quad q_j = \frac{b_j - a_j q_{j-1}}{d_j - a_j p_{j-1}}, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

$$p_0 = 0, \quad q_0 = 0$$

4.4 Esquema de Tratamento na Interface

Para se obter a espessura de filme usa-se a tensão de cisalhamento na interface, função do fator de atrito, densidade e velocidade de gás. O fator de atrito foi avaliado usando a correlação proposta por Henstock et al., (1976), a qual considera as irregularidades na superfície da camada de líquido em contato com o gás.

A temperatura na interface é calculada através das equações de energia entre as duas regiões (região do líquido e região do gás), mas as temperaturas calculadas das duas regiões, na interface devem ser iguais ou ter entre elas uma tolerância de 10^9 .

A concentração de CO_2 na interface é obtida a partir da solução das equações de balanço de massa entre as duas regiões (região do líquido e região do

gás). Da mesma forma do análise para temperatura, na interface as duas concentrações calculadas devem ser iguais ou ter uma tolerância de 10^{-9} já que, as concentrações de ambos lados da interface relacionam-se através das condições de equilíbrio entre as duas fases.

O cálculo da temperatura e concentração de CO_2 na interface com suas respectivas tolerâncias são as condições para o cálculo da seguinte linha na malha computacional. Caso isso não aconteça, o modelo matemático tem que executar várias iterações até atingir a tolerância de 10^{-9} , para logo realizar os cálculos na linha seguinte.

4.5 Esquema de Solução do Sistema Algébrico

A solução do sistema algébrico, após a discretização das equações da região do líquido, foi resolvida iterativamente pelo método TDMA linha a linha. Este é um algoritmo iterativo que resolve o sistema de equações algébricas para situações bidimensionais. O procedimento de solução é realizado para as linhas horizontais, do topo para o fundo da coluna, fazendo avaliação da temperatura e concentração de CO_2 na interface gás-líquido.

Na região do gás, a solução algébrica é feita através de método implícito de trapézio. A solução é para situações unidimensionais, e o procedimento da solução é realizado ponto a ponto na linha vertical do topo para o fundo da coluna, fazendo-se as avaliações da temperatura e concentração de CO_2 na interface com a região do líquido. Se as tolerâncias forem satisfatórias, podem-se avançar os cálculos para a linha seguinte e assim sucessivamente, até atingir a última linha onde, deve satisfazer uma tolerância de diferença relativa menor ou igual a 0,001 para a concentração de gás C_{AG} e temperatura de gás T_G .

4.6 Critério de Convergência

Para qualquer modelo numérico de simulação, existe sempre uma diferença entre o comportamento calculado e o comportamento medido. Assim, é necessário conhecer qual é o grau de precisão pretendido, para poder interromper o processo iterativo de ajuste dos parâmetros do modelo de absorção quando tal grau for atingido.

O critério de convergência foi analisado no fundo da coluna da região de gás, onde, avaliaram-se as grandezas calculadas, a temperatura de gás T_G e a concentração de gás C_{AG} , com os dados da entrada, temperatura $T_{G_entrada}$ e a concentração $C_{AG_entrada}$. Na avaliação foi utilizado o clássico método do resíduo relativo absoluto apresentado na equação (4.13), dando como resultados satisfatórios quando a convergência chegar a 0,001 ou menor. Por outro lado, para verificar a convergência da solução, foi feito o balanço de massa das espécies no processo.

A equação de resíduo relativo absoluto expressado em termo da concentração de CO_2 na fase de gás é:

$$errC = \left| \frac{C_{AG_entrada} - C_{AG_calculado}}{C_{AG_entrada}} \right| \leq 0,001 \quad (4.13)$$

4.7 Procedimento de Solução

A condição inicial no processo para região do líquido é encontrado no topo da coluna, definida pela concentração uniforme de C_B igual a 30% em peso, para temperatura de 298 K e velocidade também uniforme. Na região do gás a condição inicial encontra-se no fundo da coluna, pela concentração de CO_2 (C_{AG}) igual a 12% em mol, a temperatura de 323 K e a velocidade uniforme.

Na região do gás no topo da coluna, a temperatura T_G , a concentração em equilíbrio na interface C_A , e a concentração C_{AG} , são tomadas como valores arbitrários no início dos cálculos, já que estas propriedades só são conhecidas no fundo da coluna. Por outro lado, as condições de contorno localizam-se na parede da coluna e na interface gás-líquido

Primeiro calcula-se a espessura do filme. Através da solução da equação de quantidade de movimento linear, arbitrando um valor inicial para a tensão de cisalhamento na interface gás-líquido τ_G . A solução da espessura é obtida quando convergir o τ_G . No processo seguinte, o cálculo é realizado na região do gás resolvendo-se as equações de balanço de energia e de massa com o método de trapézio implícito. A temperatura e as concentrações obtidas são valores aproximados, uma vez que as condições iniciais foram tomadas valores

arbitrários. Prossegue-se com o cálculo na região do líquido, a partir da primeira linha da malha computacional, usando-se o TDMA para as equações discretizadas de balanço de massa e de energia, obtendo-se a concentração de CO_2 (C_A) absorvido. A concentração C_{Ai} e a temperatura T_i calculadas na interface gás-líquido, avalia-se com a temperatura T_{Gi} e a concentração C_{Ai} da região do gás, onde, a tolerância entre eles deve ser menor ou igual a 10^{-9} para continuar com os cálculos na seguinte linha. O processo repete-se para as próximas linhas e assim sucessivamente, os cálculos para as linhas seguintes até atingir no fundo da coluna.

Após a convergência de todas as equações de conservação, linha a linha, verifica-se a temperatura T_G e concentração C_{AG} calculadas, no fundo da coluna na região do gás com os dados de entrada, e a tolerância absoluta relativa deve ser menor ou igual a 0,001. Se não foram satisfatórios devem se assumir novos valores para a condição inicial na região gás, mas estes novos valores devem ser 0,9 vezes o valor já usado no começo da solução, se o $T_{G(n+1)}$ calculado é maior do que o valor da entrada $T_{Gentrada}$, ou 1,1 vezes, se $T_{G(n+1)}$ calculado é menor. A mesma análise é feita para a concentração $C_{AG(n+1)}$.

A última verificação da convergência dos resultados é feita com um balanço de massa das espécies no processo, e se aceita os resultados como satisfatórios se o balanço for menor ou igual a 10^{-6} . Caso contrário, fazem-se novas alterações, nas tolerâncias, a malha ou a discretização das equações utilizadas.

4.8 Domínio Computacional

O domínio computacional foi gerado pelo próprio modelo matemático. Para definir a malha a ser utilizada, realizou-se um teste de malha com três distribuições diferentes (Tabela 4.1).

Tabela 4.1- Teste de malha

	Total de nós	Nós na seção radial	Nós na direção vertical
Malha 1	6.006	6	1.001
Malha 2	11.011	11	1.001
Malha 3	22.011	11	2.001

A Figura. 4.2 mostram-se seções das malhas utilizadas na região do líquido, em todos os casos, as malhas foram construídas uniformemente espaçadas.

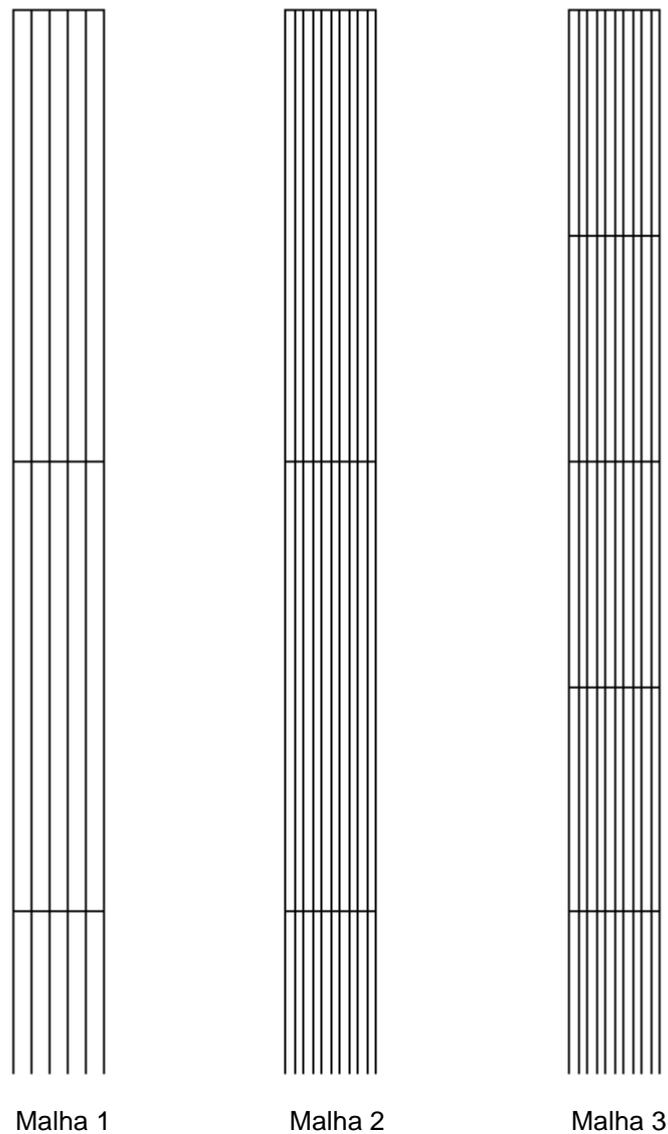


Figura 4.2- Seções de domínios computacionais

A partir da comparação dos resultados obtidos para o componente radial da concentração de CO_2 em diversas seções transversais, selecionou-se a Malha 2 por apresentar resultados quase coincidentes com o resultado da Malha 3, porém com um esforço computacional bem menor. Os resultados destas comparações encontram-se no Apêndice A.