

3. Método Numérico

Para quantificar o processo de deposição de parafina em um duto, implementou-se um módulo numérico no código para escoamento transiente bifásico TRANSFLUX Stuckenbruck (1994). O código, escrito em Fortran, utiliza o método de Volumes Finitos para resolver as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia em linhas solitárias. O método consiste em dividir o domínio computacional em volumes de controle, especificar um ponto nodal no centro de cada volume e integrar as equações de conservação no tempo e no espaço.

O modelo emprega o procedimento de malhas deslocadas, isto é, as grandezas escalares são calculadas em certos pontos nodais, enquanto aquelas de natureza vetorial, como velocidades, são avaliadas nas interfaces dos volumes básicos. A metodologia evita a obtenção de campos oscilatórios irrealistas para a pressão e velocidade, Patankar (1980). A integração temporal é realizada por um procedimento fortemente implícito para todas as equações de conservação no domínio espacial, que utiliza uma aproximação *upwind* para os termos convectivos.

Como apresentado no Capítulo 2, para determinação dos campos de velocidade, fração volumétrica, pressão e temperatura é necessário acrescentar equações de estado e equações empíricas para certos parâmetros como coeficiente de atrito, transferência de calor e tantos outros. O código TRANSFLUX utiliza equações de estado e fator de atrito obtidos a partir do código CORE da Universidade de Tulsa. Para implementação do novo módulo de deposição de parafina foi necessário adicionar equações de estado relacionadas com propriedades termofísicas, assim como correlações para diversos outros parâmetros.

3.1 Discretização Numérica das Equações

A Figura 3.1 ilustra uma malha de discretização típica. As equações de conservação de massa local e global e energia contendo informações relativas às grandezas escalares, como fração volumétrica, pressão e temperatura são integradas no volume de controle principal P, entre as faces oeste (*w*, *West*) $i-1/2$ e leste (*e*, *east*) $i+1/2$ (e, leste) do volume. A equação de conservação da quantidade de movimento é integrada no volume de controle deslocado em relação a malha principal entre o ponto Principal (P) i e leste (E) $i+1$ sendo a velocidade do fluido $v_{i+1/2}$ armazenada na face leste (*e*, *east*).

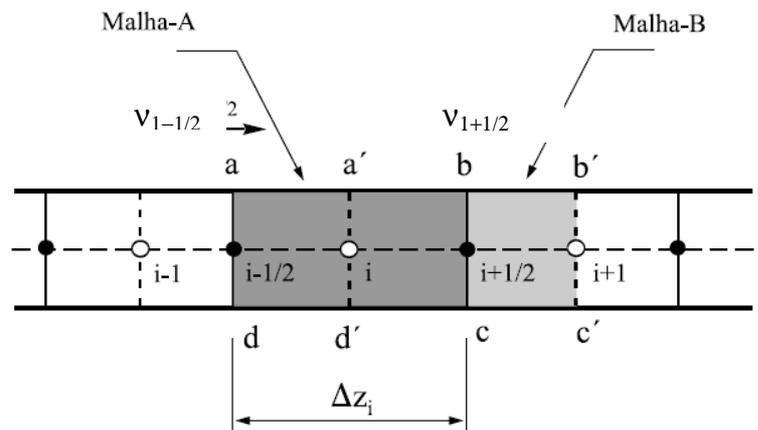


Figura 3.1 Malha de discretização deslocadas.

Todas as equações de conservação apresentadas no Capítulo 2 podem ser representadas pela seguinte equação geral para a variável ϕ

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial \rho v \phi}{\partial z} = S \quad (3.1)$$

onde S é o termo de fonte.

Integrando esta equação implicitamente no tempo e no volume de controle principal obtém-se

$$\frac{(\rho \phi)_i - (\rho \phi)_i^o}{\Delta t} + [(\rho v \phi)_{i+1/2} - (\rho v \phi)_{i-1/2}] \Delta z_i = S_i \Delta z_i \quad (3.2)$$

onde o subscrito o indica instante de tempo anterior e i o índice representativo do bloco- i .

Para avaliar variáveis nos limites da célula principal utilizou-se o esquema *upwind*, onde o valor na face é definido como sendo igual ao valor do ponto nodal à montante. Para qualquer variável ϕ , definida no centro da célula, tem-se.

$$\begin{aligned} \langle \phi v \rangle_{i+1/2} &= \phi_i v_{i+1/2} & \text{se } v_{i+1/2} &\geq 0 \\ &= \phi_{i+1/2} v_{i+1/2} & \text{se } v_{i+1/2} &< 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

As equações discretizadas resultantes assumem então a forma

$$a_i \phi_i = b_i \phi_{i+1} + c_i \phi_{i-1} + d_i, \quad (3.4)$$

onde os coeficientes a_i , b_i , c_i e d_i representam conjunto de variáveis das equações. Este sistema, contendo N equações para os N-blocos de discretização, é tridiagonal, sendo facilmente resolvido por um algoritmo de solução (direta) de matrizes tridiagonais.

3.2 Solução do Sistema Algébrico

Discretizadas as equações diferenciais, obtém-se um conjunto de equações de diferença, formando um sistema algébrico não-linear, identificando matematicamente como um sistema funcional não-linear. Equações não-lineares são normalmente resolvidas de forma iterativa, isto é, a partir de um valor estimado x^k , corrige-se este valor para encontrar a solução x que satisfaz a equação $G(x) = 0$. No presente caso, temos um conjunto de quatro equações de conservação (equação de continuidade do gás, da mistura, quantidade de movimento da mistura e energia da mistura) conforme descrito no capítulo 2. A solução é obtida linearizando o conjunto de equações pelo método de Newton-Raphson. Descrevemos a seguir o procedimento geral.

Seja $G_m(x_1, x_2, x_3, x_4) = 0$ ($m=1,4$) um funcional representando cada uma das quatro equações e x_ϕ ($\phi=1,4$) as quatro incógnitas. Numa forma vetorial podemos representar o sistema pela equação,

$$G(x) = 0 \quad (3.5)$$

onde G é o vetor funcional contendo as quatro funcionais e x o vetor incógnita

constituído pelas seguintes incógnitas fração volumétrica de gás α_g , velocidade de mistura v_m , pressão p e temperatura T . Ou seja, $x = (\alpha_g, v_m, p, T)$.

Expandindo em série de Taylor em torno de uma aproximação x^k obtemos,

$$G(x^k + \delta x) = G(x^k) + \frac{\partial G(x^k)}{\partial x} \delta x \approx 0 \quad (3.6)$$

onde $\partial G(x_0)/\partial x$ é a matriz Jacobiana sendo uma matriz 4x4 no caso presente.

Logo, a solução para o incremento δx é,

$$\delta x = - \left[\frac{\partial G(x^k)}{\partial x} \right]^{-1} G(x^k) \quad (3.7)$$

e, assim, num processo iterativo, a solução para a iteração $(k+1)$ é obtida de

$$x^{k+1} = x^k + \delta x \quad (3.8)$$

Como cada equação de conservação discretizadas é uma matriz tridiagonal, a matriz G também é uma matriz tridiagonal, sendo que cada elemento da matriz é uma matriz 4×4 . A inversa da matriz Jacobiana é obtida utilizando-se o método de eliminação de Gauss otimizado para matrizes tridiagonais. A cada processo de interação newtoniana é verificado o processo de convergência a partir de valores máximos admissíveis para os incrementos da velocidade, fração volumétrica de gás, pressão e temperatura

Para avaliar a matriz Jacobiana é necessário identificar a dependência das diferentes grandezas com as variáveis dependentes.

A massa específica da mistura, Eq. (2.5) é

$$\rho_m = \alpha_g \rho_g + (1 - \alpha_g) \rho_l$$

Derivando, obtém-se

$$\delta \rho_m = (\rho_g - \rho_l) \delta \alpha_g + \alpha_g \delta \rho_g + \alpha_l \delta \rho_l \quad (3.9)$$

onde a massa específica da gás ρ_g e do líquido ρ_l dependem da pressão p e temperatura T , de acordo com suas respectivas equações de estado. Logo, uma

variação dessas grandezas pode ser reescrita em função de variações de pressão e temperatura, como

$$\delta\rho_g = \frac{\partial\rho_g}{\partial p}\delta p + \frac{\partial\rho_g}{\partial T}\delta T \quad (3.10)$$

$$\delta\rho_l = \frac{\partial\rho_l}{\partial p}\delta p + \frac{\partial\rho_l}{\partial T}\delta T \quad (3.11)$$

Pode-se então reescrever uma variação da massa específica da mistura diretamente como variações das variáveis dependentes α , p e T

$$\delta\rho_m = (\rho_g - \rho_l)\delta\alpha_g + \left[\alpha_g \frac{\partial\rho_g}{\partial p} + \alpha_l \frac{\partial\rho_l}{\partial p} \right] \delta p + \left[\alpha_g \frac{\partial\rho_g}{\partial T} + \alpha_l \frac{\partial\rho_l}{\partial T} \right] \delta T \quad (3.12)$$

Procedimento análogo pode ser empregado para o fluxo de massa, o qual é reescrito em função de v_m , α , p e T

$$\delta(\rho_m v_m) = v_m \delta\rho_m + \rho_m \delta v_m \quad (3.13)$$

Finalmente o fluxo convectivo da energia interna também pode ser reescrito em função das variáveis dependente. A partir da Eq. (2.11)

$$\rho_m u_m = \alpha_g \rho_g u_g + \alpha_l \rho_l u_l$$

tem-se

$$\delta(\rho_m u_m) = (\rho_g u_g - \rho_l u_l) \delta\alpha_g + \delta\rho_g \alpha_g u_g + \delta\rho_l \alpha_l u_l + \rho_g \alpha_g \delta u_g + \rho_l \alpha_l \delta u_l \quad (3.14)$$

onde

$$\delta u_g = \frac{\partial u_g}{\partial p} \delta p + \frac{\partial u_g}{\partial T} \delta T \quad (3.15)$$

$$\delta u_l = \frac{\partial u_l}{\partial p} \delta p + \frac{\partial u_l}{\partial T} \delta T \quad (3.16)$$

3.3 Procedimento Solução para Deposição de Parafina.

A Figura (3.2) apresenta o diagrama de fluxo que resume a seqüência simplificada empregada no processo de solução do sistema para o cálculo da deposição de parafina. O procedimento pode ser descrito pelos seguintes passos.

1. Entrada de dados: parâmetros geométricos, número de volumes de controle, tipo de fluido, propriedades físico químicas, condições de contorno;
2. Inicialização das variáveis com seus valores característicos e calculam-se as condições iniciais partindo dos dados de entrada;
3. Determinação das propriedades dos fluidos utilizando as correlações empíricas obtidas das rotinas core em Beggs e Brill (1984) e disponíveis do passo anterior;
4. Solução das equações de conservação e determinação das seguintes variáveis: fração de vazios, velocidade da mistura, pressão de fluxo e temperatura média do escoamento;
5. Verificação do critério de convergência do processo de iteração e atualização das variáveis;
6. Uma vez atingido o critério de convergência. Atualização com os novos valores de fração de vazios, velocidade da mistura, pressão de fluxo e temperatura média do escoamento;
7. Comparação da temperatura média do escoamento com a TIAC. Se $T > TIAC$, não ocorre deposição e o diâmetro interno da tubulação não é alterado. Se $T \leq TIAC$, calcula-se o fluxo da massa em direção a parede. Calcula-se a espessura do depósito e determina-se o novo diâmetro interno da tubulação;
8. O passo de tempo é incrementado, e retorna-se ao passo 3 para a determinação da solução para o novo passo de tempo. A simulação termina com quando o tempo especificado para a simulação é atingido.

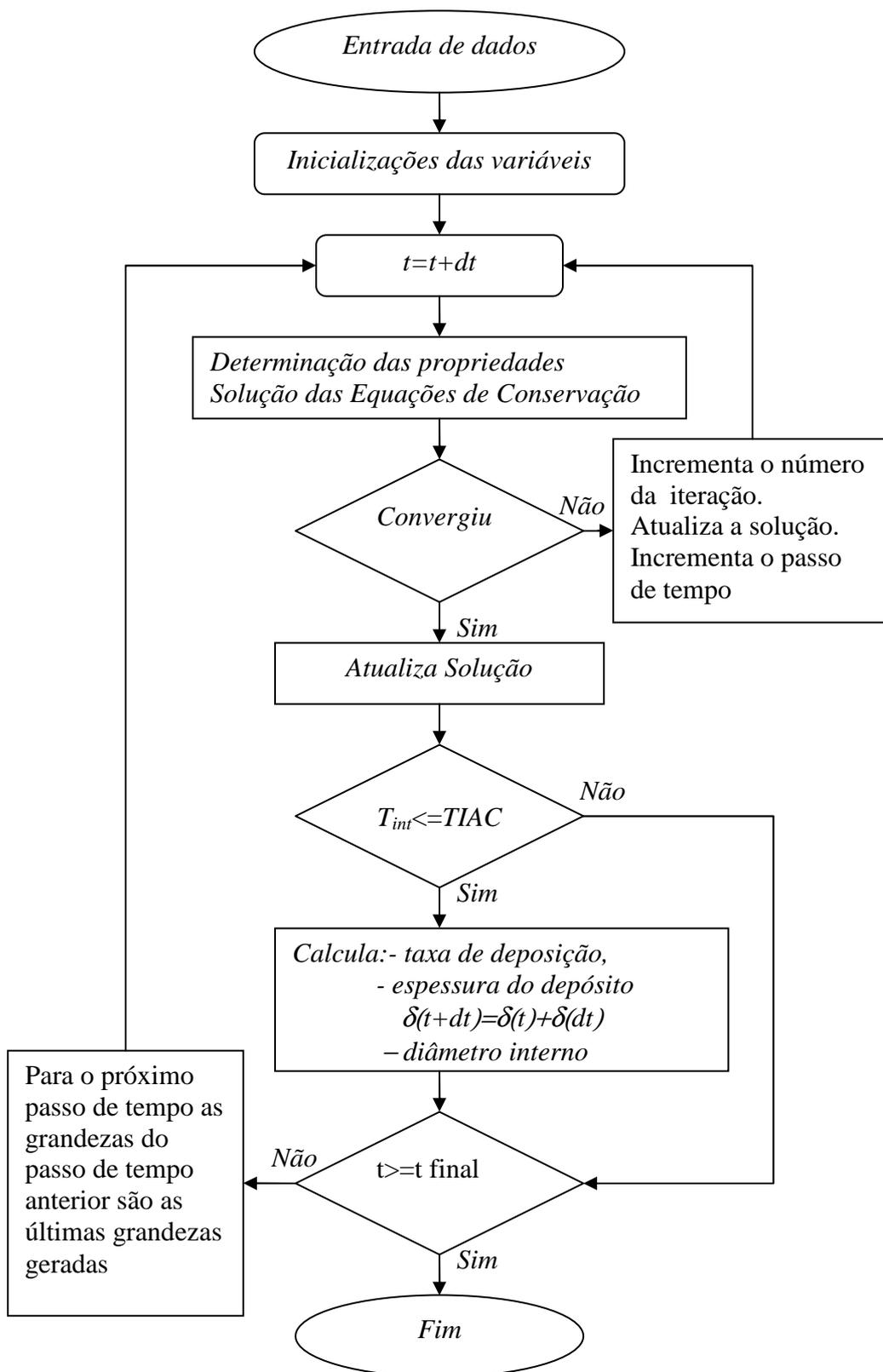


Figura 3.2 Fluxograma