

4 Método Numérico

O estudo numérico da influência do regime turbulento no fenômeno da deposição foi realizado através da solução das equações de conservação apresentadas no Capítulo 3. Um módulo referente às grandezas turbulentas foi incluído no programa computacional previamente utilizando por Souza (2014), o qual foi desenvolvido utilizando o método dos volumes finitos (Patankar, 1980).

A seguir uma breve descrição do método numérico utilizado. Maiores detalhes podem ser encontrados no trabalho de Souza (2014).

No método de volumes finitos, o domínio da solução é dividido em um número finito de volumes de controle. Dentro de cada um deles localiza-se um nó computacional, no qual são calculados os valores das variáveis. Cada equação diferencial é integrada no tempo e nos volumes de controle, garantindo conservação global de todas as variáveis relevantes. Os fluxos convectivos e difusivos são aproximados nas faces dos volumes de controle em função dos valores nodais, obtendo-se uma equação algébrica para as variáveis de interesse em cada um dos pontos.

A integração temporal foi realizada considerando o esquema totalmente implícito (Euler implícito de 1ª ordem), enquanto que a integração espacial foi feita considerando o esquema *Power-Law* (Patankar, 1980). Para resolver o acoplamento velocidade-pressão foi utilizado o algoritmo SIMPLEC (Van Doormaal & Raithby, 1984).

Os sistemas de equações algébricas obtidos pela discretização das equações diferenciais foram resolvidos pelo método iterativo TDMA linha por linha (Patankar, 1980) e o algoritmo de correção por blocos (M. Kelkar & V. Patankar, 1989) foi utilizado para acelerar a convergência.

A malha foi construída conforme o método B (Patankar, 1980), onde os pontos nodais são localizados no centro geométrico dos volumes de controle e os volumes nas fronteiras possuem espessura nula. O algoritmo foi desenvolvido utilizando malha deslocada conforme ilustrado na Fig. 4.1. As grandezas escalares são armazenadas no ponto nodal principal P, possuindo vizinhos leste, oeste, norte e sul (representado pelas letras maiúsculas, E, W, N, S). As

velocidades são armazenadas nas faces, as quais são referenciadas com símbolos minúsculos. O algoritmo foi desenvolvido utilizando malha não uniforme, visando obter solução acurada com um número menor de pontos, i.e., permitindo concentrar a malha em regiões de gradientes mais acentuados. Uma vez que a malha possui uma disposição não uniforme, a distância entre as faces (ou a espessura do volume) não é a mesma em todas as coordenadas do domínio.

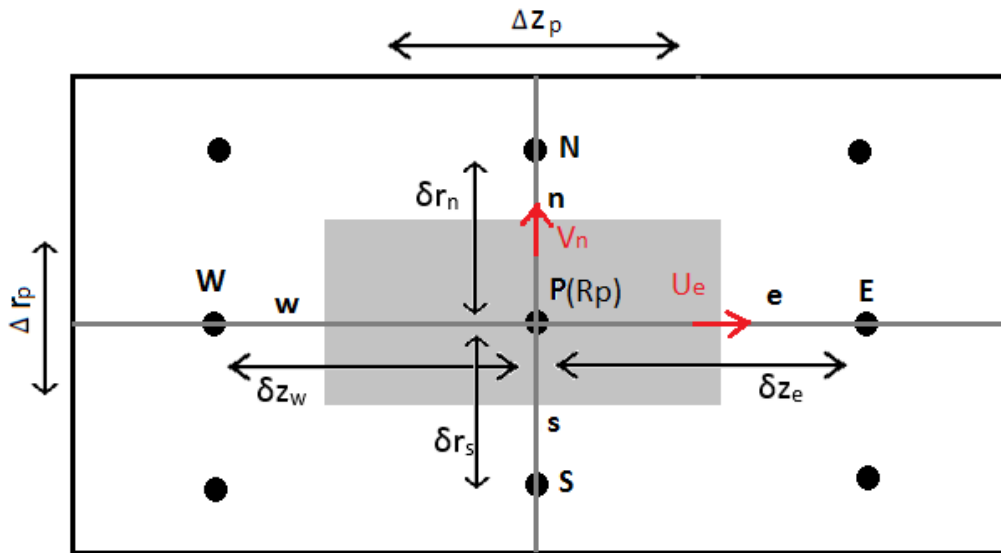


Figura 4.1: Distribuição da malha e nomenclatura dos pontos.

4.1 Discretização das Equações de Conservação

Todas as equações de conservação apresentadas no Capítulo 3 podem ser consideradas como um caso particular da equação geral de conservação, Eq. (4.1),

$$\frac{\partial(\tilde{\rho}\phi)}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\tilde{\rho}\bar{u}_r\phi)}{\partial r} + \frac{\partial(\tilde{\rho}\bar{u}_z\phi)}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + S_c + S_p \phi \quad (4.1)$$

onde $\tilde{\rho} = S_o \rho_o$ e para cada ϕ , tem-se um valor correspondente de coeficiente de difusão Γ e termos de fonte S_c e S_p , conforme ilustrado na Tabela 4.1 para as equações de conservação de massa e quantidade de movimento linear e conservação das espécies. A Tabela 4.2 corresponde às equações de conservação das grandezas turbulentas.

Tabela 4.1: Coeficientes de difusão e termos de fontes.

Equação	ϕ	Γ	Sc	Sp
Continuidade	1	0	$-\frac{\partial}{\partial t}(S_s \rho_s)$	
Momentum axial	U	$S_o \mu_{ef}$	$-S_o \frac{\partial p}{\partial r} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial r} \left(S_o \mu_{ef} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} + \tilde{\rho} \kappa \right) +$ $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\Gamma \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial r} \right]$	$-\left(2 \frac{\mu_{ef}}{r^2} + S_o \frac{\mu}{K} \right)$
Momentum radial	V	$S_o \mu_{ef}$	$-S_o \frac{\partial p}{\partial z} - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(S_o \mu_{ef} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} + \tilde{\rho} \kappa \right) +$ $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \Gamma \frac{\partial \bar{u}_r}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\Gamma \frac{\partial \bar{u}_z}{\partial z} \right]$	$-S_o \frac{\mu}{K}$
Energia	T	K_{ef}	$\frac{K_{s0}}{Cp_o} \frac{1}{Cp_o} \frac{1}{Cp_o} \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial r} \frac{\partial Cp_o}{\partial r} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial z} \frac{\partial Cp_o}{\partial z} \right) - \frac{Cp_s}{Cp_o} \frac{\partial}{\partial t} (S_s \rho_s \bar{T}) +$ $[(\bar{H}_o - Cp_o \bar{T}) - (\bar{H}_s - Cp_s \bar{T})] \frac{1}{Cp_o} \frac{\partial}{\partial t} (S_s \rho_s)$	0
Conservação molar das espécies	$\frac{\bar{c}_{z,l}}{\tilde{\rho}}$	0	$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \frac{S_o}{M_o} \left(\frac{\mu_o}{Sc} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial \bar{x}_{o,l}}{\partial r} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_s c_s \bar{u}_r \bar{x}_{s,l}) +$ $\frac{\partial}{\partial z} (S_s c_s \bar{u}_z \bar{x}_{s,l})$	0
Conservação molar total	$\frac{c}{\tilde{\rho}}$	0	$\frac{\partial}{\partial r} (r S_s c_s \bar{u}_r) + \frac{\partial}{\partial z} (S_s c_s \bar{u}_z)$	0

Tabela 4.2: Coeficiente de difusão e termos de fontes das grandezas turbulentas

Equação	ϕ	Γ	Sc	Sp
Energia Cinética Turbulenta	κ	$S_o \left(\mu + \frac{\alpha^* \rho_o \kappa}{\sigma_\kappa} \frac{\kappa}{\omega} \right)$	$S_o P_\kappa + S_o P_{\kappa,poro}$	$-\beta^* f_{\beta^*} S_o \rho_o \omega$
Dissipação Específica	ω	$S_o \left(\mu + \frac{\alpha^* \rho_o \kappa}{\sigma_\omega} \frac{\kappa}{\omega} \right)$	$S_o P_\omega + S_o P_{\omega,poro}$	$-(\beta_o f_\beta S_o \rho_o \omega + \sigma_d S_o \rho_o \omega \chi_\kappa)$

A equação geral, Eq. 4.1, discretizada utilizando a integração temporal Euler implícito e aproximação *Power-Law* para os fluxos convectivo-difusivo é

$$a_P^\phi \phi_P = a_N^\phi \phi_N + a_S^\phi \phi_S + a_E^\phi \phi_E + a_W^\phi \phi_W + b^\phi \quad (4.2)$$

onde os coeficientes da discretização são

$$a_N^\phi = D_n A(|P_n|) + \llbracket -F_n, 0 \rrbracket \quad ; \quad a_S^\phi = D_s A(|P_s|) + \llbracket F_s, 0 \rrbracket \quad (4.3)$$

$$a_E^\phi = D_e A(|P_e|) + \llbracket -F_e, 0 \rrbracket \quad ; \quad a_W^\phi = D_w A(|P_w|) + \llbracket F_w, 0 \rrbracket \quad (4.4)$$

$$a_P^{\phi,o} = \frac{\tilde{\rho}_P^o}{\Delta t} r_P \Delta r_P \Delta z_P \quad (4.5)$$

$$b^\phi = a_P^{\phi,o} \phi_P^o + S_c^\phi r_P \Delta r_P \Delta z_P \quad (4.6)$$

$$a_P^\phi = a_P^{\phi,o} + a_N^\phi + a_S^\phi + a_E^\phi + a_W^\phi - S_p^\phi r_P \Delta r_P \Delta z_P \quad ; \quad (4.7)$$

onde o operador $\llbracket a, b \rrbracket$ fornece o maior valor entre a e b. O superescrito “o” indica valores conhecidos referentes ao instante de tempo anterior. F é o fluxo de massa e D é a condutância, sendo P o Peclet,

$$P = \frac{F}{D} \quad (4.8)$$

O fluxo de massa e a condutância são definidos nas faces do volume de controle como

$$F_n = r_n \Delta z_P \tilde{\rho}_n V_n \quad ; \quad F_s = r_s \Delta z_P \tilde{\rho}_s V_s \quad (4.9)$$

$$F_e = r_P \Delta r_P \tilde{\rho}_e U_e \quad ; \quad F_w = r_P \Delta r_P \tilde{\rho}_w U_w \quad (4.10)$$

$$D_n = \frac{\Gamma_n r_n \Delta z_P}{\delta r_n} \quad ; \quad D_s = \frac{\Gamma_s r_s \Delta z_P}{\delta r_s} \quad (4.11)$$

$$D_e = \frac{\Gamma_e r_P \Delta r_P}{\delta z_e} \quad ; \quad D_w = \frac{\Gamma_w r_P \Delta r_P}{\delta z_w} \quad (4.12)$$

Nas Eqs (4.9) e (4.10), o símbolo V é referente ao componente radial de velocidade \overline{u}_r e o símbolo U ao componente axial \overline{u}_z . As condutâncias nas faces são calculadas utilizando o conceito de resistência equivalente (Patankar, 1980). Já as massas específicas nas faces são obtidas por interpolação linear.

A função $A(|P|)$ correspondente ao esquema Power-Law é

$$A(|P|) = \llbracket (1 - 0,1 |P|)^5, 0 \rrbracket \quad (4.13)$$

4.1.1 Discretização de grandezas auxiliares

Todas as contribuições difusivas para os termos de fonte foram discretizados utilizando diferenças centrais e as contribuições convectivas foram discretizadas com a aproximação *upwind* (Patankar, 1980).

De acordo com a seção 3.4.4, o calor específico à pressão constante para a mistura na fase líquida Cp_o é calculado numericamente como:

$$Cp_o = \frac{H_o(T+dT) - H_o(T)}{dT} \quad (4.14)$$

sendo o incremento de temperatura igual a $dT = 0,25$ K. Este valor foi definido após uma série de testes visando identificar a independência do incremento de temperatura na estimativa do calor específico (Souza, 2014).

No interior do depósito, despreza-se a turbulência para o terceiro modelo de turbulência, o que corresponde a definir a viscosidade turbulenta como igual a zero dentro desta região do domínio. Adicionalmente, as fontes $P_{\kappa,poro}$ e $P_{\omega,poro}$ são nulas em todo o domínio. A região de contorno foi determinada então como sendo aquela cuja saturação de sólido é superior à saturação de sólido mínima de um depósito, mas o volume seguinte (seguindo eixo radial) tem saturação de sólido inferior. Nesta região foi calculado o valor da dissipação específica considerando a viscosidade molecular naquele ponto, conforme descrito no capítulo de modelo matemático. A energia cinética nessa região foi considerada zero.

4.2 Convergência

Todas as equações de conservação enunciadas na seção anterior são consideradas solucionadas quando o resíduo da equação de interesse é inferior a uma tolerância arbitrada. Esta relação pode ser expressa matematicamente como:

$$Res_{\phi} = a_P^{\phi} \phi_P - \left[a_N^{\phi} \phi_N + a_S^{\phi} \phi_S + a_E^{\phi} \phi_E + a_W^{\phi} \phi_W + b^{\phi} \right] \leq tol \quad (4.15)$$

Além das equações, processos iterativos como a rotina de equilíbrio de fases (dentre outros) se valem da mesma relação para determinar a convergência. Os valores de tolerância adotados foram: 10^{-6} para a solução das equações de conservação do escoamento (ou seja, velocidades, correção da pressão e grandezas turbulentas), 10^{-1} para o enlace de solução da equação de energia representado na Fig. 4.2. A solução do método iterativo para determinar o equilíbrio de fases (também representado na Fig. 4.2) foi de 10^{-3} . Para o resíduo da concentração das espécies, o critério adotado foi de 10^{-2} . Caso o resíduo normalizado da concentração seja inferior a este valor, LSTEP se torna verdadeiro e a solução avança no tempo.

A solução das equações do escoamento (componentes da velocidade, correção da pressão, energia cinética e dissipação específica para o caso de regime turbulento) é resolvida, portanto, nesta ordem em uma rotina iterativa. Ao término de cada iteração é verificado se o resíduo máximo de massa do líquido é inferior a tolerância arbitrada de 10^{-6} . O programa somente prossegue para calcular os campos de temperatura e de concentração de cada uma das espécies em caso afirmativo.

4.3 Algoritmo de Solução

A Figura 4.2 ilustra o fluxograma utilizado para resolver o modelo entalpia-porosidade. Este consiste de um laço contínuo para cada instante de tempo, quando são solucionados os campos do escoamento e o modelo termodinâmico. A contribuição do presente trabalho corresponde à inclusão do módulo referente ao modelo de turbulência, indicado em azul na Fig. 4.2.

O algoritmo pode ser descrito com os seguintes passos:

- Leitura do arquivo de configuração, cujos dados servem para determinar as condições do experimento que se pretende representar tais como propriedades do fluido, vazão da bomba, geometria do ensaio, etc.
- Construção da malha não uniforme com o número de volumes informados no arquivo de configuração.
- No laço, por sua vez, são atualizadas concentrações molares, as frações de cada espécie nas fases sólidas e líquidas e o tamanho do depósito para aquele instante de tempo. A cada passo de tempo é feito então:
- A atualização dos valores de concentração molar conforme o último campo

de $\overline{cZ_i}$. A partir da rotina de equilíbrio de fases se determina a quantidade molar de cada espécie na fase líquida e na fase sólida.

- Os campos de velocidade e pressão, juntamente da energia cinética turbulenta e da dissipação específica (quando o escoamento é turbulento) são resolvidos até que todo o escoamento esteja convergido.
- Os campos de temperatura (T) e espécies ($\overline{cZ_i}$) são resolvidos conforme Souza (2014).

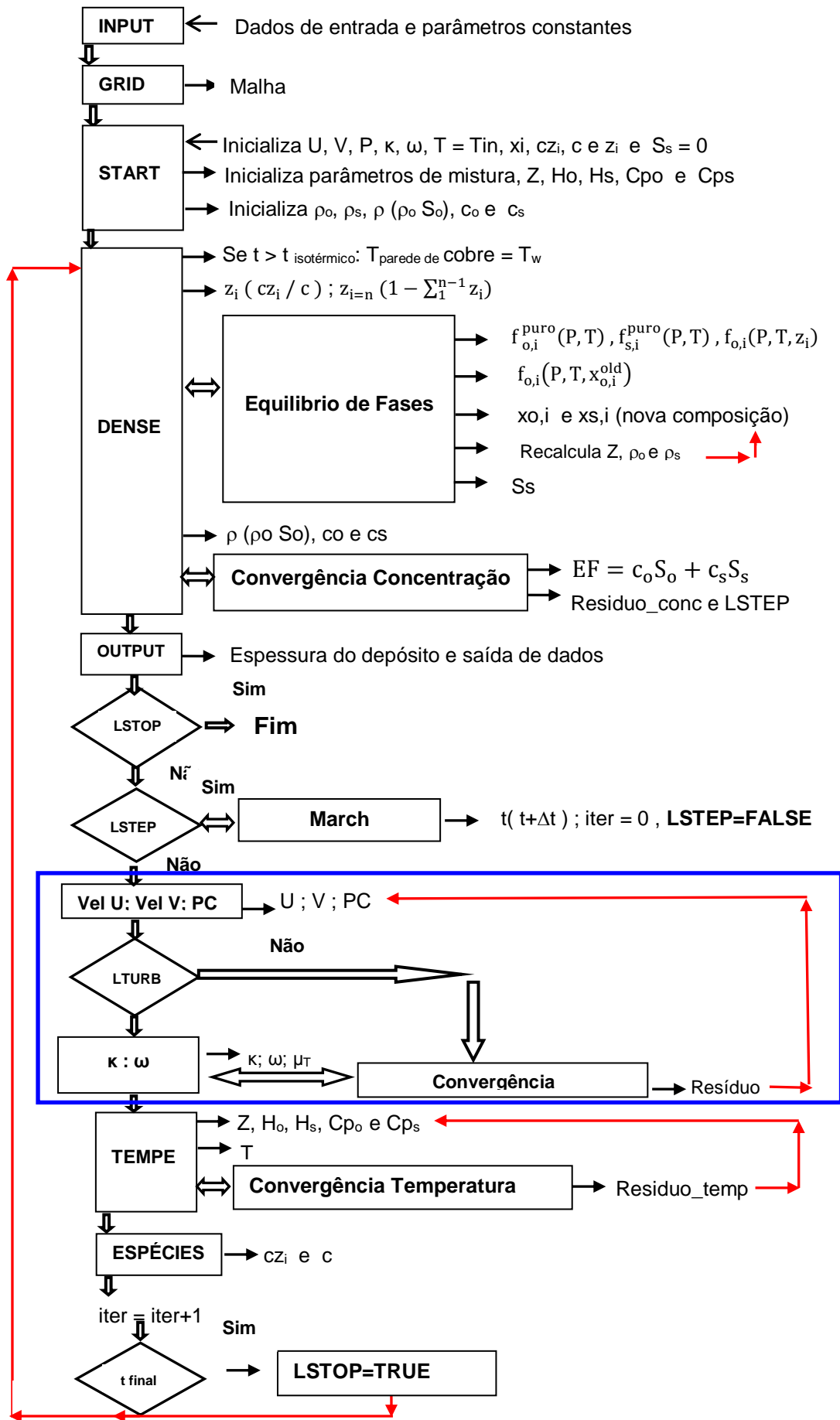


Figura 4.2: Fluxograma de solução.