

## 4

### Modelo de Difusão Uni-dimensional

Neste capítulo apresentam-se os resultados obtidos para avaliar a deposição da parafina na seção de teste descrita no Capítulo 2, utilizando o modelo de difusão uni-dimensional. Os parâmetros geométricos da seção de teste encontram-se ilustrados na fig. (2.2).

Considerou-se a mistura óleo-parafina com uma fração volumétrica de parafina dissolvida igual a 10% a uma temperatura de 40°C entrando no domínio. Inicialmente, o fluido encontra-se escoando em regime permanente com a água escoando na seção de teste a 40°C. A análise se inicia ao resfriar a água para 15°C. Quatro valores diferentes de vazão foram utilizados, visando comparar os resultados do modelo com os resultados experimentais de Leiroz (2004).

Para complementar as informações necessárias para a obtenção da solução, as propriedades utilizadas são apresentadas a seguir. Como mencionado, as propriedades foram consideradas como constantes, com exceção da solubilidade da parafina, eq. (2-3).

#### 4.0.8

##### Propriedades usadas na Solução do Problema

Na faixa de temperatura da presente análise a massa específica varia de 855 kg/m<sup>3</sup> a 842 kg/m<sup>3</sup>, fig. (2.3), o que corresponde a uma variação de 1,5%. Optou-se por considerar como valor representativo da massa específica, o seu valor obtido na temperatura de Névoa (TIAC) de 36,6 °C, sendo igual a 844 kg/m<sup>3</sup>.

### Propriedades Termofísicas

O calor específico da mistura óleo Spindle/parafina, foi determinado a partir da sua densidade utilizando-se a seguinte correlação,

$$cp_m = \frac{A}{(d_{15/4})^{0.5}} + B (T - 15), \quad (4-1)$$

no qual  $d_{15/4}$  é a densidade da parafina avaliada a 15 °C com relação a densidade da água avaliada a 4°C,  $T$  é a temperatura em °C, na qual a propriedade deve ser avaliada e  $A$  e  $B$  são constantes que dependem do fluido. Segundo a literatura, os seguintes valores são recomendados para óleos parafínicos:  $A=0,425$ ;  $B=9,2 \times 10^{-4}$ . O calor específico na eq. (4-1) é dado em cal/(g°C). Considerando os valores de referência baseados na temperatura da TIAC, utilizou-se calor específico igual 2018 J/(kg K).

Os valores correspondentes à condutividade térmica da mistura e calor latente foram definidos como  $k = 0,23$  W/(m K) e  $\lambda = 2,644 \times 10^5$  J/kg, respectivamente. Considerou-se a porosidade da parafina sólida igual a 0,86 de acordo com Burger (1981).

### Coefficiente de Difusão Molecular

Para especificar o coeficiente de difusão utilizou-se a correlação proposta por Hayduk e Minhas (1982). Esta correlação proposta para a determinação da difusividade molecular de parafinas em solventes parafínicos, com um erro médio de 3,4%, é dada por

$$D_m = 1,33 \times 10^{-7} \frac{T^{1,47} \mu^\gamma}{V_A^{0,71}} \quad (4-2)$$

em cm<sup>2</sup>/s, no qual  $T$  é a temperatura absoluta em Kelvin,  $\mu$  é a viscosidade absoluta do solvente em g/(cm s),  $V_A$  é o volume molar de parafina em (cm<sup>3</sup>/mol), dado pela razão do peso molecular  $M_m$  em (g/mol) e da massa específica  $\rho_m$  em (g/cm<sup>3</sup>) e  $\gamma$  é uma função de  $V_A$ ,

$$\gamma = \frac{10,2}{V_A} - 0,791 \quad ; \quad V_A = \frac{M_m}{\rho_m}. \quad (4-3)$$

A viscosidade absoluta da mistura foi obtida a partir da equação (2-2), avaliada na temperatura de Névoa de 36,6 °C, como sendo igual a  $\mu = 1,02 \times 10^{-2}$  Pa.s.

Para complementar as informações referentes às propriedades, no presente trabalho, mediu-se em um espectrômetro de massa no laboratório

do Departamento de Química da PUC-Rio, o peso molecular da mistura.

Os parâmetros moleculares médios da mistura óleo Spindle/parafina, foram obtidos pelo Método de Ressonância Magnética Nuclear de  $^1H$  e  $^{13}CO$ . A seguinte composição foi encontrada:

- $C_{40}H_{82}$  para o Óleo Spindle
- $C_{13}H_{28}$  para a Parafina

Com o peso molecular médio de cada componente e a composição da mistura, obteve-se o peso molecular da mistura igual a 218 g/mol.

De acordo com a eq. (4-2), o coeficiente de difusão molecular é igual a  $D_m = 2,09 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ .

A tabela (4.0.8) apresenta um resumo das propriedades termofísicas utilizadas.

Propriedade	Mistura	Parafina	Cobre	Vidro	Acrílico
$\rho$ [kg/m <sup>3</sup> ]	844	844	8920	2707	1190
$k$ [W/(mK)]	0,23	0,23	401	1,3	0,21
$cp$ [J/(kg K)]	$2,018 \times 10^3$	$2,018 \times 10^3$	383	835	1465
$\lambda$ [J/kg]	-	$2,644 \times 10^5$	-	-	-
$\mu$ [Pa.s]	$1,02 \times 10^{-2}$	-	-	-	-
$D_m$ [m <sup>2</sup> /s]	$2,09 \times 10^{-10}$	-	-	-	-
$M_m$ [g/mol]	218	-	-	-	-
$\phi$	-	0,86	-	-	-

Tabela 4.1: Propriedades Termofísicas

## 4.1

### Resultados do Modelo Unidimensional

O modelo de difusão unidimensional descrito no Capítulo 2, tem sido utilizado por diversos pesquisadores como Ribeiro et al. (1997) e Brown et al. (1993). Ribeiro et al. (1997) empregou o mesmo modelo em uma geometria circular. Visando validar a metodologia implementada no presente trabalho, alterou-se os parâmetros geométricos do presente problema e comparou-se com os resultados de Ribeiro et al. (1997), obtendo-se excelente concordância.

Considerando a geometria utilizada na experiência realizada por Leiroz (2004), e descrita no Capítulo 2, determinou-se a espessura depositada da parafina utilizando-se o modelo de difusão uni-dimensional e comparou-se com os dados medidos para a espessura depositada de parafina. Quatro

valores diferentes de número de Reynolds iguais a 366, 516, 688 e 856 foram investigados, sendo o número de Reynolds definido como sendo:

$$Re = \frac{\rho_m u_m D_h}{\mu} \quad (4-4)$$

onde  $u_m$  é a velocidade média,  $\rho_m$  é a massa específica da mistura,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $D_h$  é o diâmetro hidráulico.

Os resultados foram obtidos com uma malha com 150 volumes de controle na direção axial e um passo de tempo de 2 segundos.

A variação da espessura da parafina depositada ao longo do canal de seção retangular, para diferentes instantes de tempo, é apresentada nas figs.(4.1), (4.2), (4.3) e (4.4), correspondentes aos para números de Reynolds 366, 516, 688 e 856, respectivamente. Os resultados obtidos numericamente no presente trabalho pelo primeiro modelo são representados pelas linhas contínuas, enquanto que os dados experimentais encontram-se representados por pontos. Tanto a espessura de deposição como a coordenada axial ao longo do canal são dados em milímetros. A comparação dos resultados numéricos com os experimentais são apresentados para instantes de tempo de 1, 3, 5 e 10 minutos após o início do resfriamento do escoamento, ao utilizar água escoando a 15°C; a comparação também foi feita quando não houve mais crescimento do depósito, indicando que o regime permanente havia sido atingido.

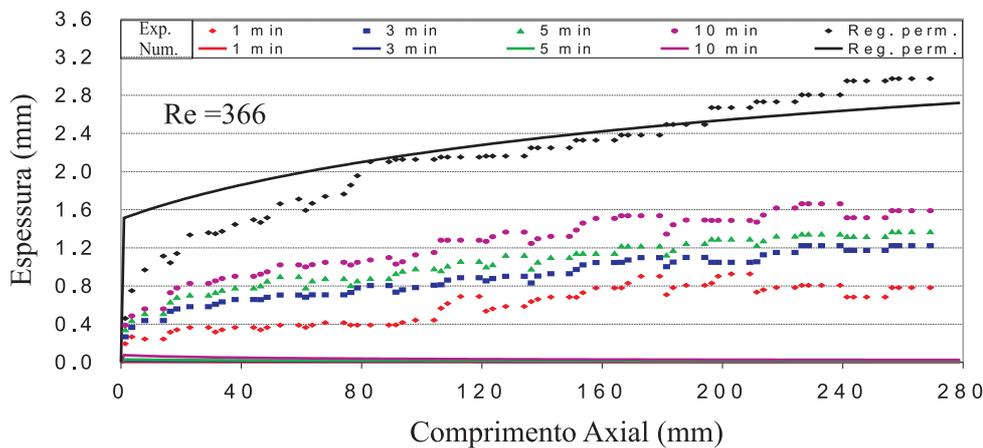


Figura 4.1: Evolução espacial e temporal do depósito de parafina, Re=366.

Analisando-se os dados experimentais nas figs. (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4) observa-se um rápido crescimento da camada de depósito. Os primeiro 10 minutos são responsáveis por mais de 50% do depósito final, obtido no regime permanente. Observa-se ainda que a deposição da parafina cresce na direção do escoamento.

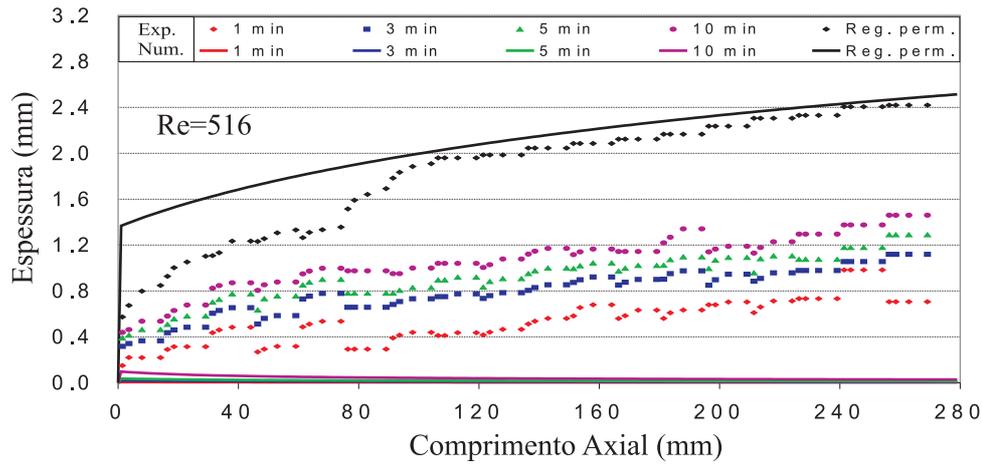


Figura 4.2: Evolução espacial e temporal do depósito de parafina,  $Re=516$ .

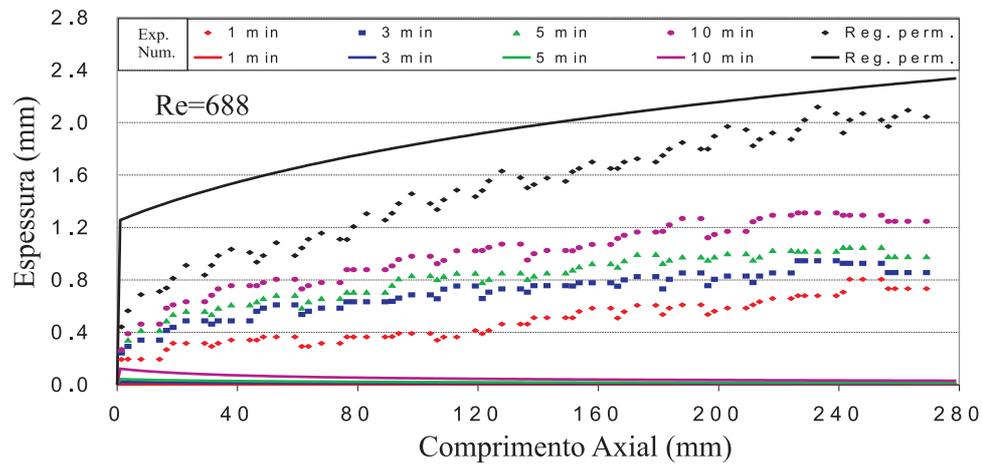


Figura 4.3: Evolução espacial e temporal do depósito de parafina,  $Re=688$ .

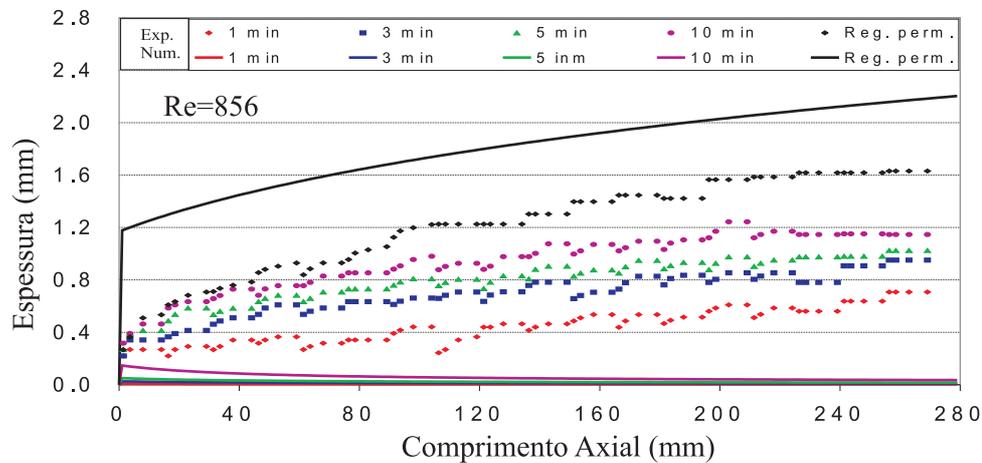


Figura 4.4: Evolução espacial e temporal do depósito de parafina,  $Re=856$ .

Nestas figuras, os dados numéricos obtidos com o modelo de difusão unidimensional também são apresentados, e são representados pelas linhas contínuas. Selecionou-se o mesmo código de cores, referente a cada instante de tempo, que o utilizado para apresentar os dados experimentais, para facilitar a comparação. Observa-se uma péssima concordância entre os resultados, com exceção dos casos em regime permanente. Não só a taxa de deposição obtida numericamente é muito mais lenta, como o modelo não é capaz de prever a correta tendência da distribuição espacial do depósito.

Na fig. (4.5) compara-se os resultados obtidos numericamente no regime permanente, com os dados experimentais, para diferentes números de Reynolds. Pode-se observar uma concordância razoável entre os dados. Note que a medida que o número de Reynolds aumenta, uma camada menos espessa de parafina é depositada. O modelo conseguiu prever corretamente esta tendência, no entanto, a discrepância entre os resultados cresce com o número de Reynolds.

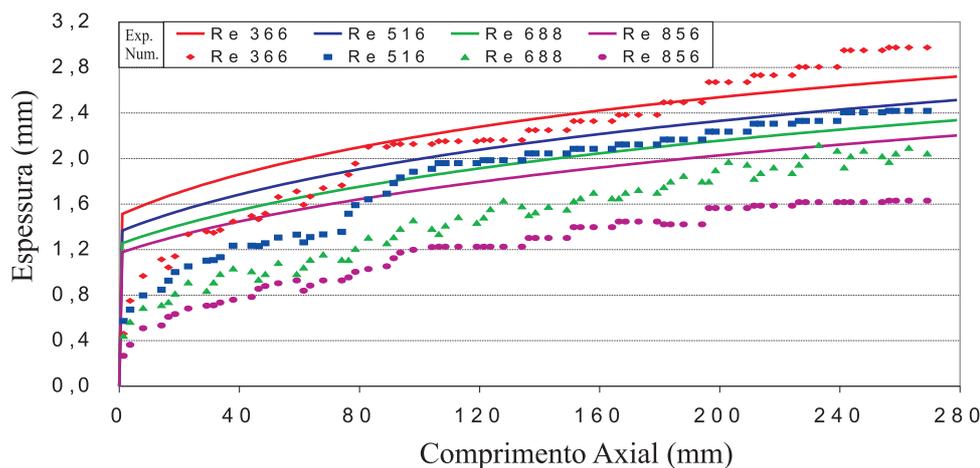


Figura 4.5: Espessura do depósito de parafina para diferentes números de Reynolds, em regime permanente.

Para melhor visualizar o perfil axial da espessura de depósito para diferentes instantes de tempo, apresenta-se na fig. (4.6), para  $Re = 366$ , o perfil axial de depósito para 20, 40, 90 e 180 minutos após o início do resfriamento, assim como o perfil axial quando atinge o regime permanente. O depósito cresce bruscamente na entrada do canal, para depois cair ao longo do mesmo. Observa-se também que a espessura de depósito pára de crescer primeiro próximo à entrada. Note ainda que após 40 minutos a metade da espessura final ainda não foi atingida.

Este baixo nível de concordância também é encontrado em todos os modelos disponíveis na literatura, os quais utilizam o mecanismo de difusão molecular. O procedimento usual encontrado na literatura disponível, para

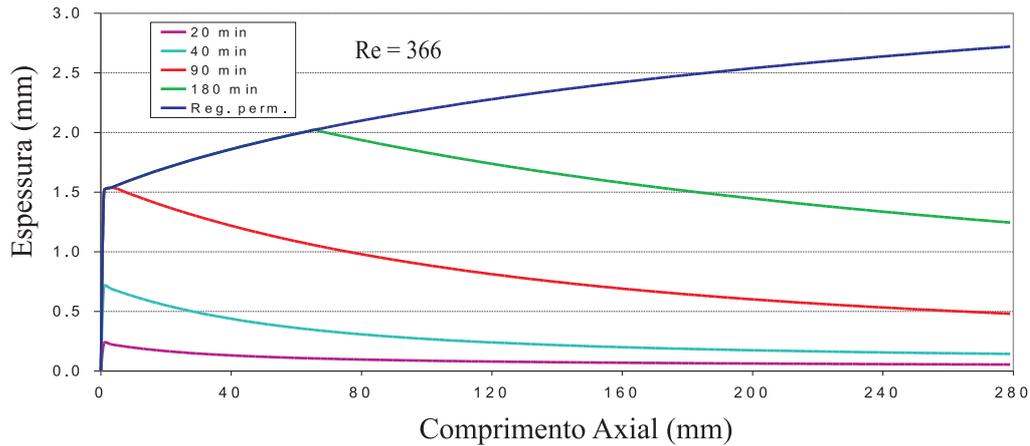


Figura 4.6: Evolução temporal do depósito de parafina, para diferentes instantes de tempo.  $Re=366$ .

melhorar a concordância das previsões numéricas, consiste em ajustar parâmetros do modelo, como coeficiente de difusão, porosidade, etc. A equação para avaliar a taxa de deposição apresentada no Capítulo 2, e reescrita aqui é

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = \frac{(T_m - T_{H_2O})}{\gamma [1 + h_i (e_c/k_c + \delta/k_p)]} ; \gamma = \frac{k_m}{h_i \beta} - \frac{\rho_m \lambda (1 - \phi)}{h_i + (e_c/k_c + \delta/k_p)^{-1}} \quad (4-5)$$

onde

$$\beta = \frac{-D_m}{(1 - \phi)} \frac{\rho_m}{\rho_p} \frac{\partial \omega}{\partial T}. \quad (4-6)$$

Analisando a eq. (4-5) observa-se que a maior incerteza desta modelagem encontra-se no coeficiente  $\gamma$ . Investigou-se então a influência do calor latente  $\lambda$  na solução e observou-se que ao desprezar o calor latente, obteve-se exatamente as mesmas distribuições para a espessura depositada de parafina.

Para investigar a influência do parâmetro  $\beta$ , investigou-se o efeito de um coeficiente de difusão duas vezes maior do que o utilizado no caso base. Os resultados obtidos para  $Re=856$ , encontram-se na fig. (4.7), onde o caso base é denominado caso 1 e o caso 2 corresponde à situação com o dobro do coeficiente de difusão. Pode-se observa-se que a taxa de crescimento aumentou, i.e., o depósito cresceu mais rapidamente. No entanto, a tendência da curva não foi alterada. Pode-se portanto afirmar que o presente mecanismo de difusão molecular não é capaz de representar o fenômeno, mesmo para uma configuração simples, como a estudada no presente trabalho.

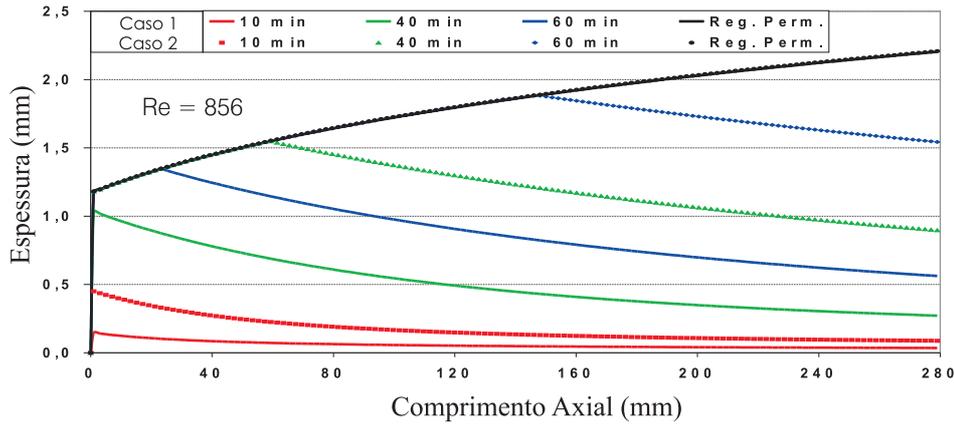


Figura 4.7: Evolução temporal do depósito de parafina, para diferentes coeficientes de difusão.  $Re=856$ .

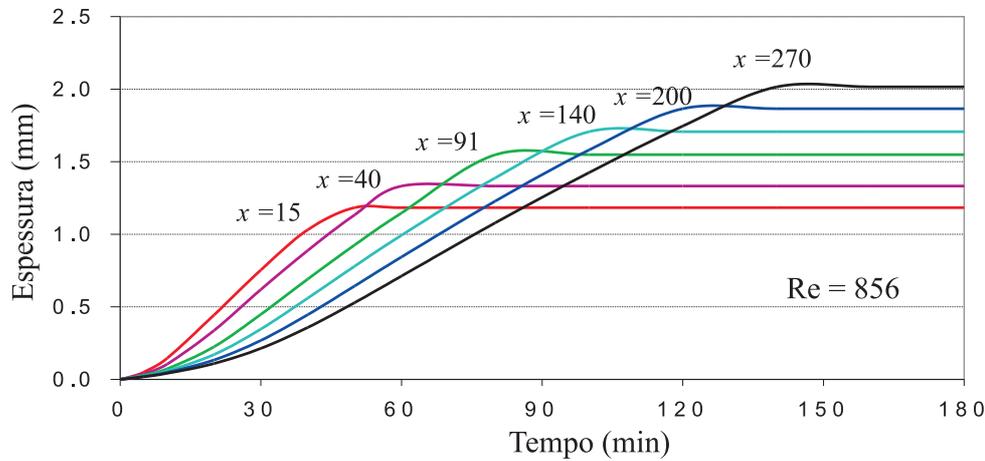


Figura 4.8: Evolução temporal do depósito de parafina, para diferentes posições,  $Re=856$ .

A fig. (4.8) ilustra a evolução temporal do frente de deposição de parafina da fig. (4.4), correspondente a  $Re=856$ , para diferentes posições ao longo do canal retangular. Como já observado, a taxa de deposição é maior para posições mais próximas da entrada, resultando numa espessura maior para o mesmo instante de tempo. Nesta figura pode-se observar melhor o fato de que o depósito pára de crescer mais cedo no começo do canal do que no final do canal. Observa-se também que após 160 minutos, não tem mais crescimento do depósito, indicando que o regime permanente tem sido atingido.

A influência do número de Reynolds na espessura de deposição para uma coordenada fixa, igual a  $x = 140$  mm, correspondente ao centro do canal, pode ser analisada na fig. (4.9). Observa-se que o depósito cresce mais rápido com maiores números de Reynolds, porém pára de crescer mais cedo, o que leva a uma menor espessura de depósito.

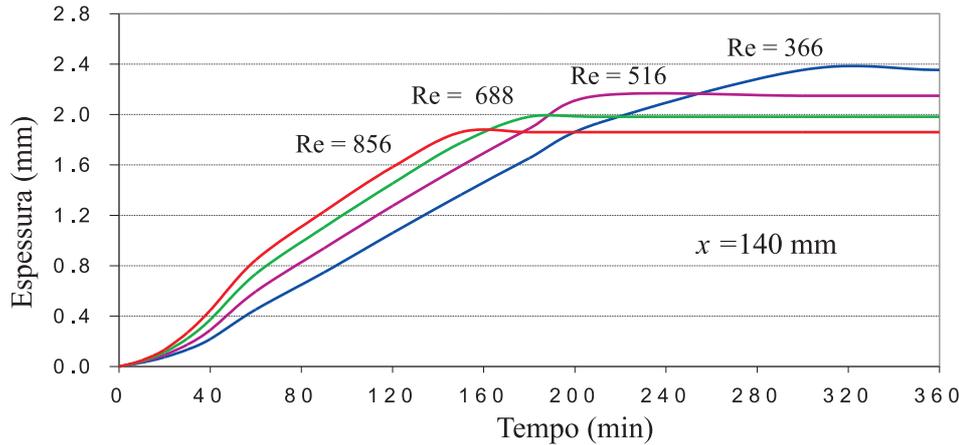


Figura 4.9: Evolução temporal do depósito de parafina, na posição central do duto, para diferentes Reynolds.

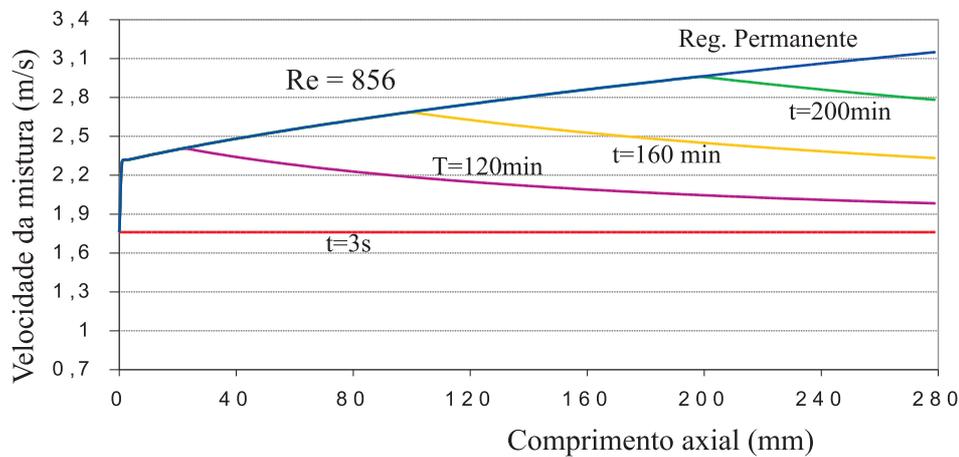


Figura 4.10: Evolução temporal da velocidade da mistura ao longo do canal retangular, Re=856.

A fig. (4.10) apresenta a variação da velocidade média da mistura ao longo do canal, para diferentes instantes de tempo, para Re=856. Apesar do modelo considerar o fluido como incompressível, a velocidade média varia devido a variação da área da seção transversal, a medida que a parafina é depositada. Como a área é diretamente proporcional a espessura do depósito,  $A = (a - 2\delta) b$ , observa-se que a variação da velocidade média é análoga a variação da espessura do depósito, crescendo a medida que o tempo passa.

A evolução temporal do perfil de temperatura da mistura ao longo do canal, para Re=856, é apresentada na fig. (4.11). Pode-se observar uma queda abrupta da temperatura no instante inicial, devido à mudança na condição de contorno da temperatura externa da superfície do cobre, de 40°C a 15°C. Note que a medida que o tempo passa, como a parafina é

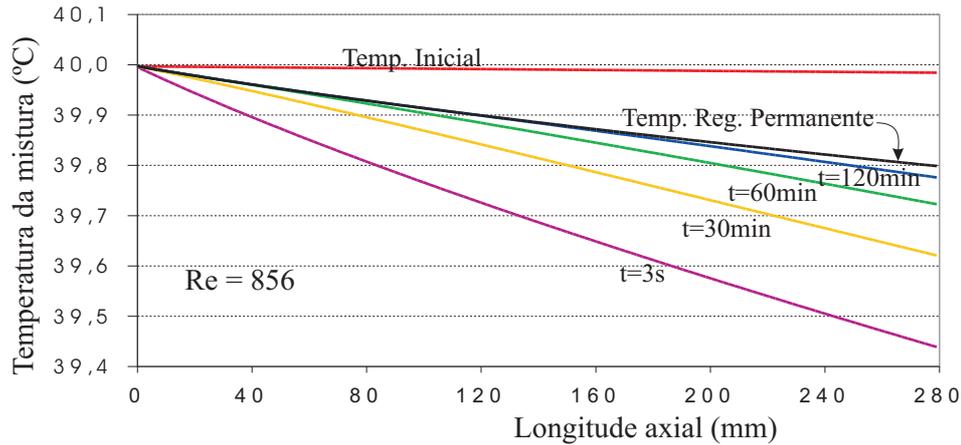


Figura 4.11: Evolução temporal do perfil da temperatura de mistura ao longo do duto retangular,  $Re=856$

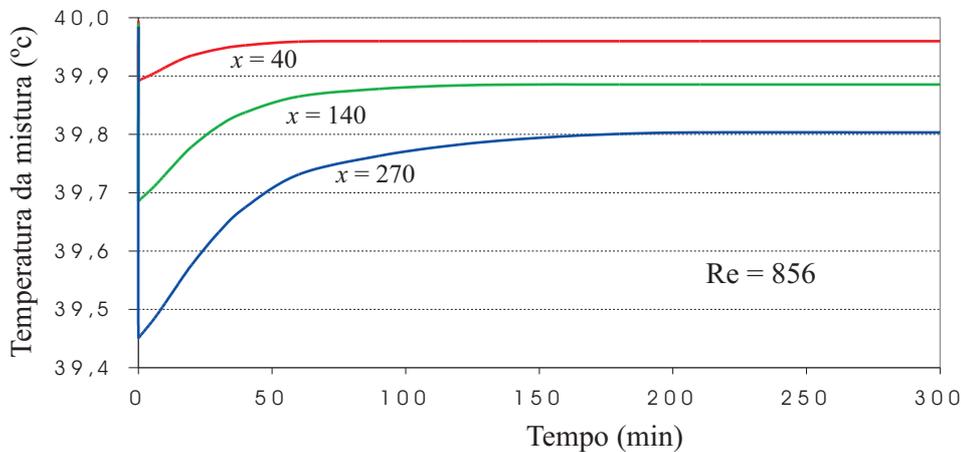


Figura 4.12: Evolução temporal da temperatura da mistura para diferentes posições ao longo do canal retangular,  $Re=856$ .

depositada, diminuindo a área da seção transversal, a velocidade média cresce, conforme mostrado na fig. (4.10), conseqüentemente a influência do fluxo de calor convectivo cresce, resultando em uma menor queda na temperatura, pois a influência da temperatura quente da entrada é maior.

A fig. (4.12) apresenta o mesmo resultado anterior, porém ressaltando a variação temporal da temperatura de mistura, para diferentes coordenadas ao longo do canal. Como visto a temperatura é mais baixa próximo a saída e após aproximadamente 100 minutos, a temperatura praticamente não varia.

O mecanismo de deposição só é ativado enquanto a temperatura da interface é inferior ao valor da temperatura de névoa (TIAC). Apresenta-se então a variação da temperatura da interface ao longo do canal para diferentes instantes de tempo, na fig. (4.13) e para diferentes coordenadas na fig. (4.14), para  $Re=856$ .

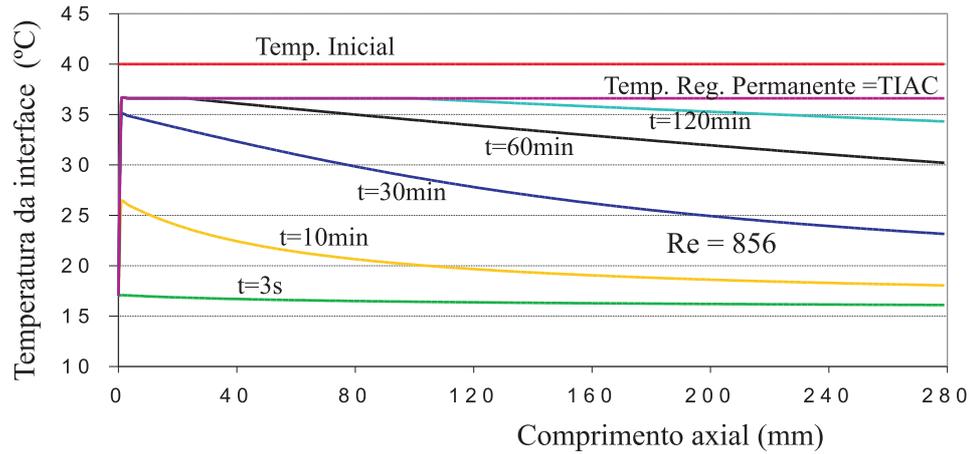


Figura 4.13: Variação da temperatura da interface ao longo do duto retangular.  $Re=856$ .

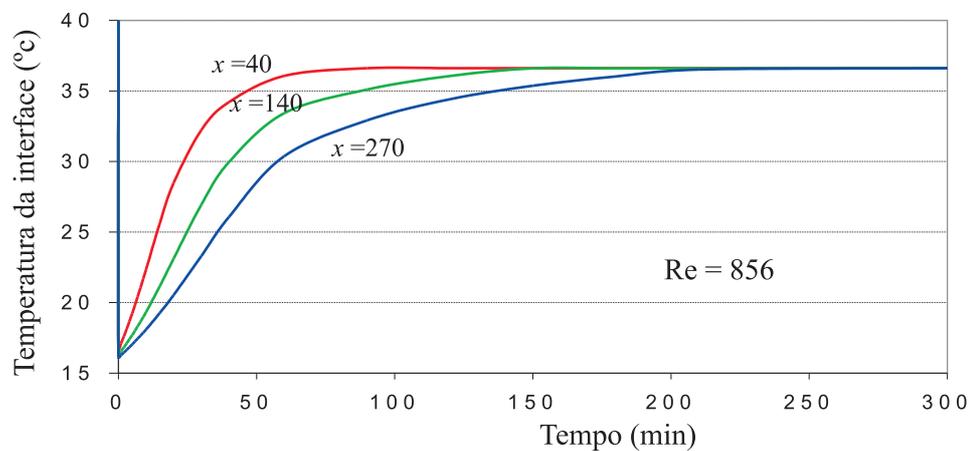


Figura 4.14: Evolução temporal da temperatura da interface para diferentes posições ao longo do canal retangular,  $Re=856$ .

A temperatura da interface depende não só da temperatura de mistura, mas também da taxa de crescimento da parafina e das resistências térmicas. Observa-se que inicialmente, como a temperatura de mistura cai, a temperatura da interface também cai. Porém a medida que o tempo passa, não só a temperatura de mistura sobe, mas a resistência térmica a condução também sobe. Como conseqüência o perfil da temperatura da interface tem uma certa semelhança com a forma da interface. Note no entanto, que no regime permanente, a temperatura da interface coincide com a temperatura da TIAC, e não há mais deposição.

A evolução do fluxo de calor através da interface à medida que o tempo passa é ilustrado na fig. (4.15). O comportamento do fluxo de calor através da interface é complexo. No início do resfriamento, observa-se uma alto fluxo de calor próximo a entrada. Este comportamento pode ser explicado pelo

alto coeficiente de troca de calor nesta região, (ver fig. 2.7).

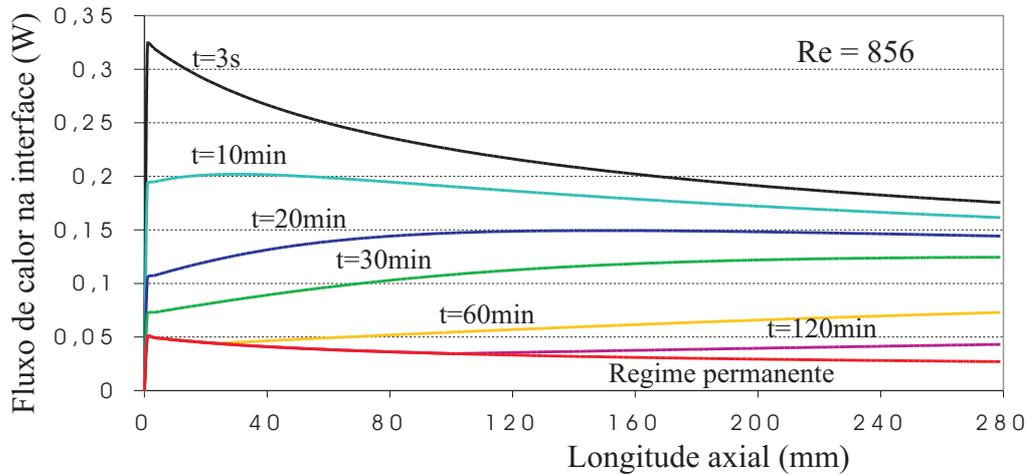


Figura 4.15: Fluxo de calor através da interface ao longo do canal retangular, para diferentes tempos.  $Re=856$ .

Devido ao alto fluxo de calor, uma taxa elevada de deposição é obtida, levando a um aumento irreal da espessura de deposição na entrada. Porém, uma vez que a parafina é depositada, a resistência térmica adicional, influencia no resfriamento da temperatura da interface ao longo do canal, a uma taxa diferente que a queda da temperatura de mistura, i.e., a diferença entre estas duas temperaturas cresce, aumentando o fluxo de calor. Porém, a medida que o tempo passa, a variação axial da espessura da parafina torna-se mais suave, as temperaturas se estabilizam, o fluxo não só diminui, mas torna-se mais uniforme.

## 4.2

### Resultados do Modelo Bidimensional

Visando a eliminar algumas das restrições do modelo unidimensional, analisou-se o problema utilizando o modelo de difusão bidimensional descrito no Capítulo 2. A principal restrição eliminada com este modelo está na determinação da taxa de deposição. O modelo unidimensional determina a taxa de deposição da parafina de forma indireta através dos fluxo de calor. No modelo bidimensional a taxa de deposição é obtida a partir do gradiente de concentração. Porém, ambos os modelos, consideram que o único mecanismo que governa a deposição é a difusão molecular.

Utiliza-se um modelo matemático que permite calcular a posição da interface com facilidade. A ligação entre as fases líquida (fluido) e sólida (parafina) é feita pela representação da interface por um volume de controle com espessura zero, não sendo necessário, termos de fonte adicionais para detectar o salto das quantidades na interface. A estimativa inicial da interface, a cada passo de tempo, é feita utilizando-se valores do passo do tempo anterior, e um número menor de cálculos é requerido até que atingia o critério de convergência.

Para ser possível utilizar a formulação bidimensional, utilizou-se um sistema de coordenadas móveis, já que o domínio de interesse é variável no tempo. Os resultados foram obtidos utilizando um passo de tempo igual a 3 segundos, com 50 volumes de controle ao longo do canal, correspondendo tanto à região do cobre, parafina e fluido; e a seguinte distribuição na vertical: (i) 101 volumes de controle na região do fluido (ii) 21 volumes na região da parafina e (iii) 31 volumes na região do cobre.

Para o modelo bidimensional a definição da malha na direção vertical é crítica, devido ao pequeno valor da difusividade molecular  $D_m$ , o que causa um gradiente muito acentuado da concentração. Um teste de malha foi realizado, onde observou-se que as diferenças entre as soluções diminuíram com o aumento da malha. Porém devido a limitações de tempo e esforço computacional, os resultados obtidos ainda não apresentaram independência da malha, durante o regime transiente. Já para o regime permanente diferenças inferiores a 5 % foram obtidos ao aumentar a malha em "y" no fluido de 50 %.

A evolução da espessura do depósito de parafina ao longo do duto retangular é ilustrado nas figs. (4.16), (4.17), (4.18) e (4.19). De forma análoga ao apresentado nas figs. (4.1), (4.2), (4.3) e (4.4) respectivamente, referentes ao primeiro modelo unidimensional, este modelo prevê uma diminuição

da espessura do depósito com a distância axial, durante o regime transiente. Novamente, pode-se observar que a espessura do depósito no regime permanente é razoavelmente bem prevista.

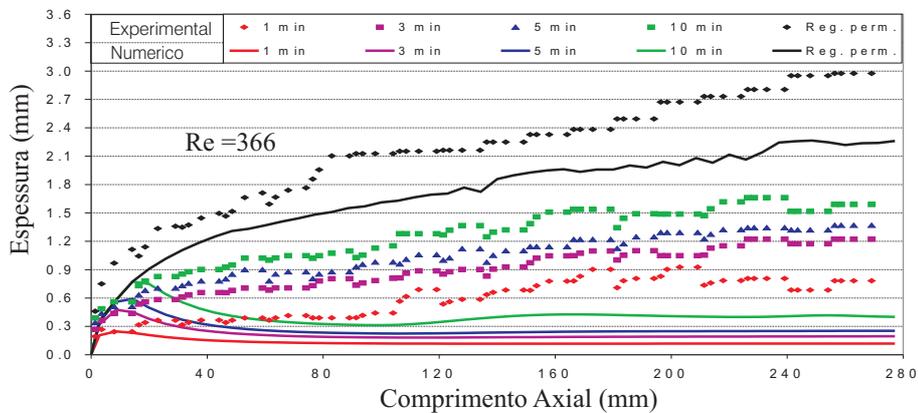


Figura 4.16: Variação temporal e espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular.  $Re=366$ .

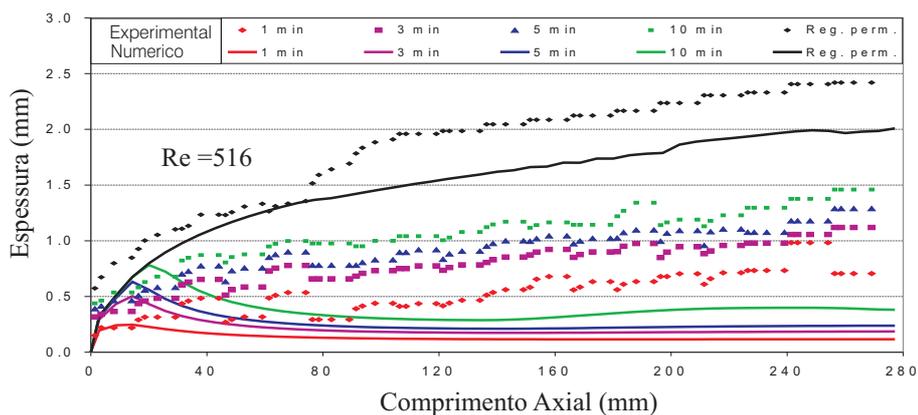


Figura 4.17: Variação temporal e espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular.  $Re=516$ .

A razoável concordância com os dados experimentais, obtida para o estado de regime permanente, pode ser explicada pelo fato de que o depósito somente pode ocorrer se a temperatura da interface for inferior à TIAC, e este valor é controlado pelo fluxo de calor por condução através da parafina depositada. Para uma mesmo fluxo de calor através da parafina, obtém-se uma temperatura maior na interface, à medida que a espessura do depósito cresce. Quando a temperatura da interface atinge o valor da TIAC, não ocorre mais deposição. Considerando este argumento, tem-se que a espessura final de parafina depositada é governada pela posição da isoterma correspondente à TIAC, a qual depende somente do problema de transferência de calor por condução no depósito, não sendo influenciada pelo processo de transferência de massa.

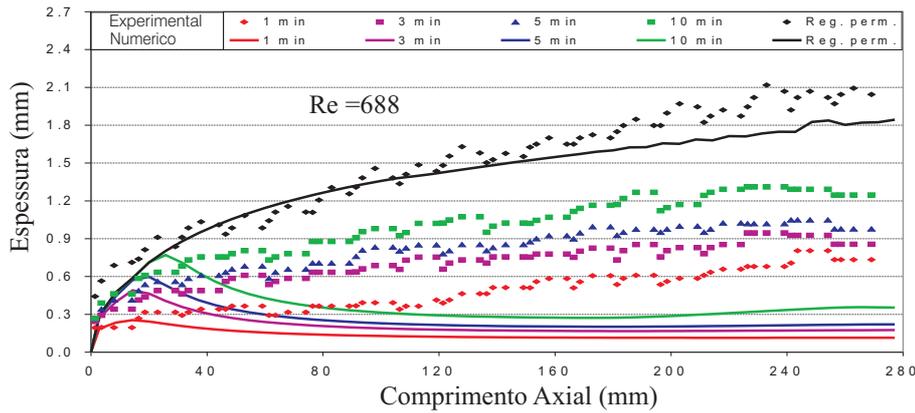


Figura 4.18: Variação temporal e espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular.  $Re=688$ .

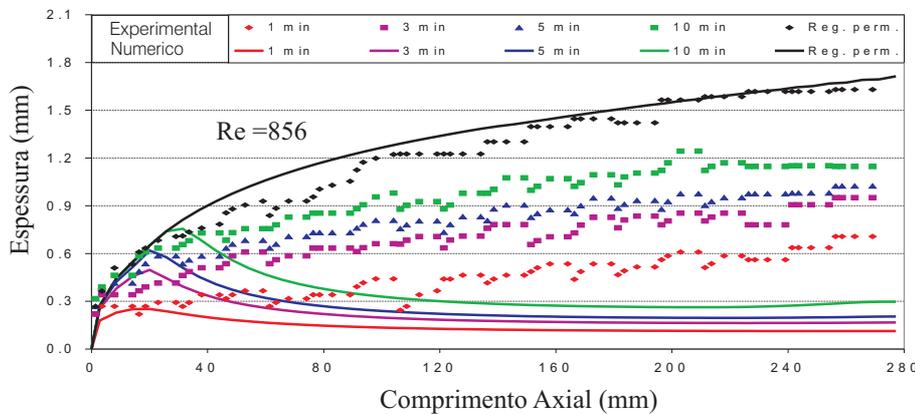


Figura 4.19: Variação temporal e espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular.  $Re=856$ .

A fig. (4.20) apresenta a distribuição do depósito no regime permanente para diferentes números de Reynolds, de forma análoga ao apresentado na fig. (4.5) referente ao modelo unidimensional. O modelo bidimensional também prevê uma camada menos espessa de parafina a medida que o número de Reynolds aumenta, de acordo com os dados experimentais. Vale observar no entanto, que enquanto a concordância entre os resultados do modelo unidimensional com os dados experimentais é maior com os menores números de Reynolds, no caso bidimensional, esta concordância é melhor para altos números de Reynolds. Este efeito pode ser melhor observado nas figs. (4.21) e (4.22).

A distribuição axial da parafina depositada no regime permanente é ilustrada na fig. (4.21), para os dois modelos, juntamente com os dados experimentais. Observa-se que o modelo bi-dimensional apresentou uma melhor concordância que o modelo uni-dimensional para o maior número de Reynold ( $Re=856$ ), que sobre-avaliou a espessura final depositada. Como

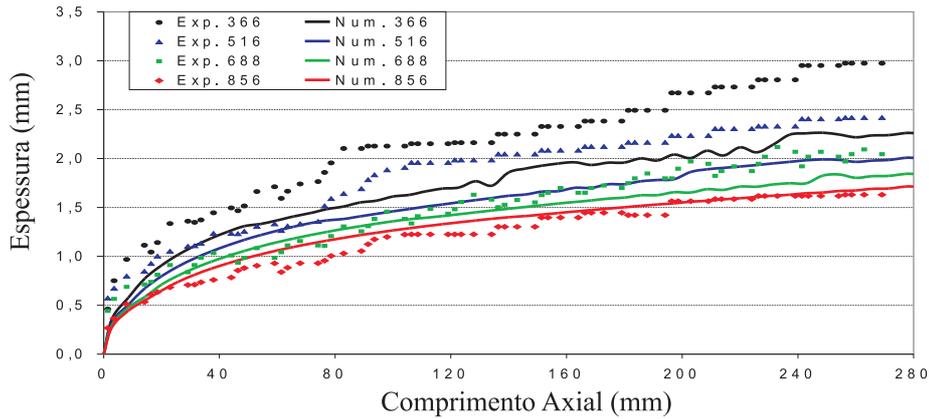


Figura 4.20: Comparação da perfil espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular. Experimental e bi dimensional. Para diferentes Reynolds, no regime permanente.

já mencionado o comportamento inverso é observado para o número de Reynolds menor, igual a 366, ilustrado na fig. (4.22).

Para explicar o aumento na discrepância entre os resultados numéricos e os dados experimentais com o decréscimo do número de Reynolds, pode-se recorrer ao trabalho de Burger *et al.* (1981), o qual mostrou que a importância relativa do mecanismo de difusão na determinação da espessura do depósito e do mecanismo associado com o transporte de partículas (*i.e* cristais), depende dos níveis de cisalhamento que prevalecem no fluido. Isto é, para baixos números de Reynolds (*i.e* baixas taxas de cisalhamento) o mecanismo de transporte de partículas começa ser igualmente relevante.

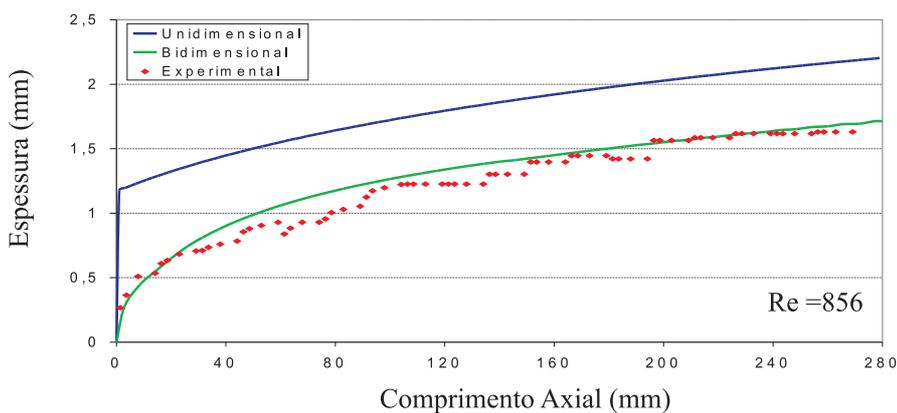


Figura 4.21: Comparação da perfil espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular. Modelo uni e bi dimensional. Re=856.

A influência da modelagem uni e bi-dimenisonal durante o regime transiente, pode ser analisada na fig. (4.23), para Re=856. Pode-se observar que, apesar do modelo unidimensional prever uma taxa de deposição menor

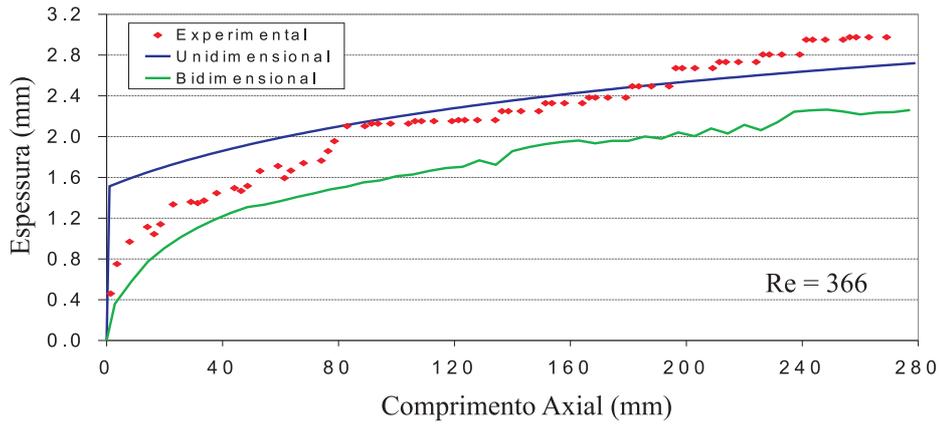


Figura 4.22: Comparação da perfil espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular. Modelo uni e bi dimensional.  $Re=366$ .

do que a prevista pelo modelo bidimensional durante o regime transiente, a espessura resultante quando o regime permanente é atingido é maior.

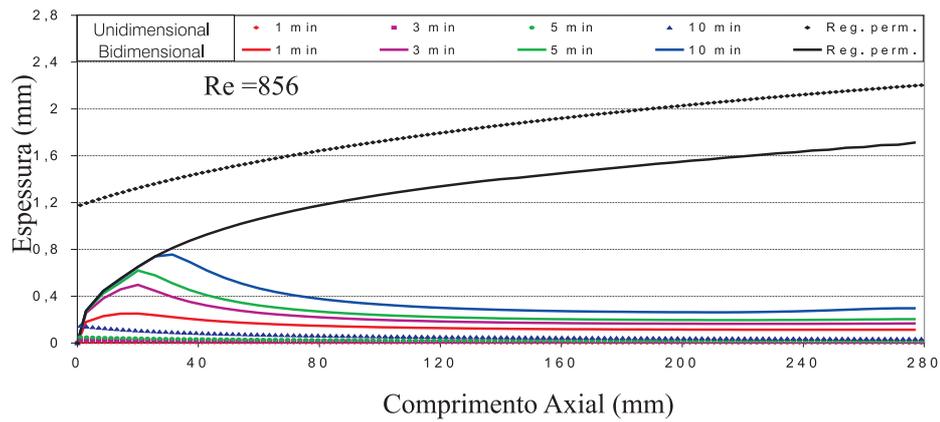


Figura 4.23: Variação temporal e espacial do depósito de parafina ao longo do canal retangular.  $Re=856$ . Comparação entre modelos 1D e 2D