

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**APLICAÇÃO DO MÉTODO DE VOLUMES FINITOS NA
SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE
ESCOAMENTO DE FLUIDOS COM TRANSFERÊNCIA
DE MASSA**

**DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA**

JOSÉ ALEXANDRE BORGES VALLE

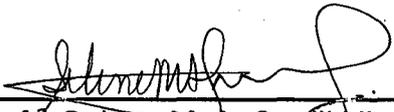
FLORIANÓPOLIS, AGOSTO DE 1995

**APLICAÇÃO DO MÉTODO DE VOLUMES FINITOS A PROBLEMAS DE
ESCOAMENTO DE FLUIDOS COM TRANSFERÊNCIA DE MASSA**

JOSÉ ALEXANDRE BORGES VALLE

**ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE
EM ENGENHARIA**

**ESPECIALIDADE ENGENHARIA QUÍMICA E APROVADA EM SUA FORMA FINAL
PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**



Prof.^a Selene M. A. Guelli Ulson de Souza, Dr. Eng.
Orientadora



Prof. Luismar M. Porto, Ph. D.
Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA:



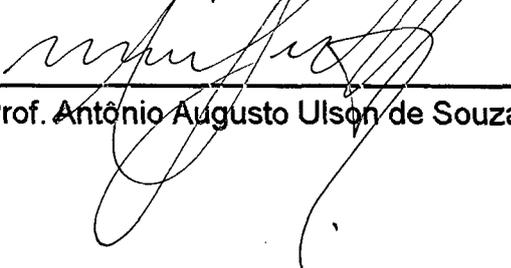
Prof.^a Selene M. A. Guelli Ulson de Souza, Dr. Eng.
Presidente



Prof. Marcelino Luiz Gimenes, Ph.D.



Prof. José Vladimir de Oliveira, D. Sc.



Prof. Antônio Augusto Ulson de Souza, Dr. Eng.

AGRADECIMENTOS

À coordenação, ao Edivilson e aos professores do curso de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Aos quatro integrantes da banca examinadora desta dissertação de mestrado, agradeço-lhes por terem aceito o convite à integrá-la, pela leitura do manuscrito e pelas sugestões apresentadas para sua melhoria.

Meus agradecimentos especiais a minha orientadora, a professora Selene M. A. Guelli Ulson de Souza e ao professor Antônio Augusto Ulson de Souza que são responsáveis em grande parte pela minha formação na área numérica.

A professora Selene M. A. Guelli Ulson de Souza pela efetiva orientação e o apoio recebido durante todo o desenvolvimento desta dissertação.

Aos colegas do LABSIN, pela amizade e colaboração durante a realização deste trabalho.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro concedido durante o desenvolvimento desta pesquisa.

Finalmente, aos meus familiares que me deram todo o apoio necessário no decorrer do curso.

ÍNDICE GERAL

| | |
|---|------|
| LISTA DE QUADROS | vi |
| LISTA DE FIGURAS | vii |
| SIMBOLOGIA | xi |
| RESUMO | xv |
| ABSTRACT | xvii |
| CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO | 01 |
| | |
| CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA | 06 |
| | |
| CAPÍTULO 3 - FORMULAÇÃO UTILIZADA | 17 |
| 3.1 - Equações governantes | 17 |
| 3.2 - Transformação das equações | 19 |
| 3.3 - Discretização das equações | 27 |
| 3.4 - Tratamento do acoplamento pressão-velocidade | 34 |
| 3.5 - Cálculo do fluxo de massa nas faces do volume de controle | 37 |
| 3.6 - Condições de contorno | 40 |
| 3.7 - Detalhes numéricos | 42 |
| | |
| CAPÍTULO 4 - RESULTADOS | 44 |
| 4.1 - Difusão em uma Cavidade Quadrada | 44 |

| | |
|---|----|
| 4.2 - Sublimação de uma esfera de naftaleno | 51 |
| 4.3 - Cavidade Quadrada com convecção mássica | 58 |
| 4.4 - Escoamento sobre uma placa plana com transferência de massa | 66 |
| | |
| CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES | 76 |
| | |
| REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 79 |
| | |
| APÊNDICE A - EQUAÇÃO PARA A CORREÇÃO DA PRESSÃO | 83 |

LISTA DE QUADROS

| | |
|--|----|
| QUADRO 1 - Valores de ϕ , Γ^ϕ e S^ϕ para as diversas equações de conservação | 21 |
| QUADRO 2 - Fração mássica obtida através da solução analítica e numérica, com malhas 30x30 e 40x40, e erro relativo à solução analítica | 50 |
| QUADRO 3 - Fração mássica obtida através da solução analítica e numérica com malha 40x40, e erro relativo à solução analítica | 56 |
| QUADRO 4 - Erro relativo médio no perfil de concentração obtido com malhas 10x10, 20x20 e 40x40 | 63 |
| QUADRO 5 - Erro máximo obtido no cálculo do número de Sherwood | 65 |

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| FIGURA 1 - Esquema geral de um processo químico | 01 |
| FIGURA 2 - Localização das variáveis na malha computacional para o arranjo de variáveis co-localizadas | 07 |
| FIGURA 3 - Campo de pressões inconsistente | 09 |
| FIGURA 4 - Localização das variáveis na malha computacional para o arranjo de variáveis desencontradas | 10 |
| FIGURA 5 - Volume de controle centrado em P e seus vizinhos | 11 |
| FIGURA 6 - Geometria adequada ao sistema cartesiano | 21 |
| FIGURA 7 - Geometria de forma não cartesiana | 22 |
| FIGURA 8 - Volume de controle genérico para integração | 28 |
| FIGURA 9 - Volume de controle para obtenção do fluxo de massa na face leste | 38 |
| FIGURA 10 - Volume fictício para aplicação das condições de contorno para as velocidades na face oeste | 40 |
| FIGURA 11 - Extrapolação linear da pressão para a fronteira leste do volume de controle | 42 |
| FIGURA 12 - Especificação das condições de contorno para problema de difusão em uma cavidade quadrada | 48 |
| FIGURA 13 - Perfil da fração mássica W_A obtido através da solução analítica e numérica, com malha 30x30 e 40x40, ao longo do eixo z, para $x=L/2$ | 49 |

| | |
|--|----|
| FIGURA 14 - Erro da fração mássica, obtido com malha 30x30 e 40x40, em relação à solução analítica em $x=L/2$ | 50 |
| FIGURA 15 - Malha 40x40 utilizada na solução da sublimação de uma esfera de naftaleno | 53 |
| FIGURA 16 - Especificação das condições de contorno para o problema de sublimação de naftaleno no ar | 54 |
| FIGURA 17 - Perfil de fração mássica (W_A), analítico e numérico, ao longo do eixo r com uma inclinação de 45° com a horizontal | 55 |
| FIGURA 18 - Erro obtido no cálculo da fração mássica com malha 40x40, em relação à solução analítica | 56 |
| FIGURA 19 - Curvas de fração mássica constante para o problema de sublimação de uma esfera de naftaleno | 57 |
| FIGURA 20 - Especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas para o problema da cavidade quadrada com convecção mássica | 60 |
| FIGURA 21 - Perfil da componente de velocidade u , para o caso de $Re = 400$, obtido com malhas cartesianas 30x30, 40x40 e 60x60 | 61 |
| FIGURA 22 - Perfil da componente de velocidade u , para o caso de $Re = 1000$, obtido com malhas cartesianas 30x30, 40x40 e 60x60 | 61 |
| FIGURA 23 - Perfil da Fração Mássica, W_A , para o caso de $Re = 400$, obtido com malhas cartesianas 10x10, 20x20, 40x40 e 60x60 | 62 |

| | |
|---|----|
| FIGURA 24 - Perfil da Fração Mássica, W_A , para o caso de $Re = 1000$, obtido com malhas cartesianas 10x10, 20x20, 40x40 e 60x60 | 62 |
| FIGURA 25 - Linhas de concentração constante, malha 40x40, $Re = 400$ | 63 |
| FIGURA 26 - Linhas de concentração constante, malha 40x40, $Re = 1000$ | 64 |
| FIGURA 27 - Influência do número de Reynolds sobre o número de Sherwood, para número de Schmidt igual a 0.6 | 65 |
| FIGURA 28 - Especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas para o problema de escoamento sobre uma placa plana | 67 |
| FIGURA 29 - Vetores velocidade do problema de escoamento sobre uma placa plana, a partir de $x=0$ | 68 |
| FIGURA 30 - Perfil da componente de velocidade u obtido pela simulação numérica, com malha 30x30, em $x=L$, para $Re=50000$ e $Sc=1.2$ | 69 |
| FIGURA 31 - Perfil da componente de velocidade v obtido pela simulação numérica, com malha 30x30, em $x=L$, para $Re=50000$ e $Sc=1.2$ | 69 |
| FIGURA 32 - Erro obtido nas componentes do vetor velocidade, em relação à solução de Blasius, em $x=L$ | 70 |
| FIGURA 33 - Perfil de concentração obtido com malha 30x30, para $Re = 50000$ e $Sc = 1.2$, em $x=L$ | 71 |
| FIGURA 34 - Erro obtido no cálculo da fração mássica, calculado em relação à solução apresentada por Burmeister [4], em $x=L$ | 71 |
| FIGURA 35 - Espessura da camada limite mássica, para $Re = 50000$ e $Sc = 1.2$ | 72 |

| | |
|--|----|
| FIGURA 36 - Erro obtido no cálculo de δ_m , comparativamente à solução apresentada por Burmeister [4] | 72 |
| FIGURA 37 - Espessura da camada limite hidrodinâmica para vários números de Reynolds | 73 |
| FIGURA 38 - Espessura da camada limite mássica para vários números de Reynolds, com $Sc = 1.2$ | 74 |
| FIGURA 39 - Espessura da camada limite mássica para vários números de Schmidt, com $Re = 50000$ | 75 |

SIMBOLOGIA

- a_i - coeficientes da equação discretizada onde $i = P, E, W, S, N, \text{ etc.}$
- b^ϕ - termo fonte da equação discretizada
- \vec{B} - vetor força de campo por unidade de volume de fluido, $[M/(L^2t^2)]$
- C_1 - variável definida pela equação (33)
- C_2 - variável definida pela equação (34)
- C_3 - variável definida pela equação (35)
- D_{AB} - difusividade do componente A no componente B, $[L^2/T]$
- D_1 - variável definida pela equação (82)
- D_2 - variável definida pela equação (83)
- D_3 - variável definida pela equação (84)
- D_4 - variável definida pela equação (85)
- g_x - componente da força do campo por unidade de massa, na direção x, $[L/t^2]$
- g_y - componente da força do campo por unidade de massa, na direção y, $[L/t^2]$
- J - jacobiano da transformação
- J^{-1} - jacobiano da transformação inversa
- $L[]$ - aproximação numérica da expressão no interior dos colchetes
- \dot{m} - vazão mássica do fluido, $[M/t]$
- \vec{n} - coordenada ao longo da direção normal à face do volume de controle, $[L]$
- P - pressão do sistema, $[M/ (L^2t^2)]$
- P^ϕ - representa o gradiente de pressão na equação (13), $[M/(L^2t^2)]$

- \hat{P}^ϕ - variável definida pela equação (28), [$M/(L^2t^2)$]
- $P(i, j)$ - ponto com coordenadas $x = i$ e $y = j$
- Pe - número de Peclet da malha, $Pe = \frac{\rho u \Delta x}{\Gamma^\phi}$
- r_A''' - taxa mássica de reação química do componente A, por unidade de volume, [$M/(L^3t)$]
- R_A''' - taxa molar de reação química do componente A, por unidade de volume, [moles/ (L^3t)]
- S^ϕ - termo fonte das equações de conservação, [$M\phi/(L^3t)$]
- \hat{S}^ϕ - variável definida pela equação (30), [$M\phi/(L^3t)$]
- t - tempo, [t]
- T - Temperatura
- u - componente da velocidade, na direção x, no sistema cartesiano, [L/t]
- U - componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/t]
- v - componente da velocidade, na direção y, no sistema cartesiano, [L/t]
- V - componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/t]
- \vec{V} - vetor velocidade do fluido, [L/t]
- W_A - fração mássica do componente A
- x - coordenada do sistema cartesiano, [L]
- y - coordenada do sistema cartesiano, [L]

LETRAS GREGAS

- α - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (36)
- β - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (37)
- γ - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (38)
- $\bar{\alpha}$ - parâmetro definido pela equação (69)
- $\bar{\beta}$ - parâmetro definido pela equação (70)
- Γ^ϕ - difusividade relativa à variável ϕ multiplicada pela massa específica do fluido,
[M/ (Lt)]
- η - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]
- μ - viscosidade dinâmica do fluido, [M/(Lt)]
- ξ - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]
- ρ - massa específica do fluido, [M/t³]
- $\bar{\tau}$ - tensor tensão, [M/(Lt²)]
- τ_{ij} - componente do tensor tensão, [M/(Lt²)]
- ϕ - campo escalar geral

ÍNDICES SUPERIORES

- ' - correção da variável
- * - estimativa da variável
- P - valores relativos à equação da pressão

- u** - valores relativos à equação de conservação de quantidade de movimento na direção x
- v** - valores relativos à equação de conservação de quantidade de movimento na direção y

ÍNDICES INFERIORES

e, n, s, w, se, sw, ne, nw - valores relativos às faces leste, norte, sul, oeste, sudeste, sudoeste, nordeste e noroeste, respectivamente, do volume de controle centrado em P

E, N, S, W, SE, SW, NE, NW - valores relativos aos volumes de controle vizinhos ao volume de controle centrado em P

nb - pontos vizinhos ao ponto P , como E, W, S, N , etc.

RESUMO

O presente trabalho apresenta uma metodologia para a solução de escoamento de fluidos, com transferência de massa, em coordenadas generalizadas, utilizando o arranjo de variáveis co-localizadas.

Para a obtenção da solução de problemas de escoamento de fluidos, multicomponentes, com transferência de massa, é necessária a solução das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química para cada componente presente na mistura. Em virtude do forte acoplamento existente entre as equações e a presença de termos não lineares, é necessária a utilização de métodos numéricos. O método numérico utilizado é o de Volumes Finitos, que garante a conservação das grandezas envolvidas a nível elementar e global.

A maioria dos problemas encontrados na Engenharia Química envolve a transferência de um dado componente de uma região de maior concentração para outra de menor concentração, sendo necessária a solução da equação de conservação da espécie química, para a obtenção do perfil de concentração do componente de interesse.

A obtenção do perfil de concentração de um dado componente de uma mistura é de fundamental importância para o cálculo do coeficiente de transferência de massa, utilizado nos projetos dos principais equipamentos da Engenharia Química.

O algoritmo numérico desenvolvido é empregado para a obtenção da solução de problemas com e sem convecção forçada, com transferência de massa.

É utilizado, no Método de Volumes Finitos, o esquema WUDS para avaliação dos fluxos convectivos e difusivos nas faces do volume de controle, bem como, o arranjo de variáveis co-localizadas na malha computacional.

A metodologia apresentada é testada resolvendo-se problemas cujas soluções analíticas, ou obtidas com malhas bem refinadas, são disponíveis.

ABSTRACT

The current work presents a methodology for the solution of fluid flow, with mass transfer, in generalized coordinates, using the arrangement of co-located variables.

To obtain the solution of problems of fluid flow with various components, involving mass transfer, it is necessary to solve the mass, momentum and chemical species conservation equation for every component present in the mixture. Due to the strong coupling existent between the equations and the presence of nonlinear terms, it is necessary the utilization of numerical methods. The numerical method used is the Finite Volume Method, which guarantees the conservation of the involved variables at elementary and global levels.

The most Chemical Engineering problems deal with the transfer of a given component from a region with greater concentration to other with lower concentration, being necessary the solution of chemical species conservation equation, for obtaining the concentration profile for the component.

The knowledge of the concentration profile of a given component of a mixture is important for the calculation of the mass transfer coefficient used on the main equipment projects in the Chemical Engineering.

The numerical algorithm developed is employed for obtaining the solution of the problems with and without forced convection, involving mass transfer.

It is utilized, in the Finite Volume Method, the WUDS scheme for evaluation of convective and diffusive terms on the faces of the control volume, as well as the arrangement of co-located variables on the computational grid.

The methodology presented is confirmed by solving problems whose analytical solutions, or solutions obtained with grid well refined, are available.

INTRODUÇÃO

Na indústria química, um importante número de operações com transferência de massa envolve a transferência de um componente de uma região de maior concentração para outra de menor concentração, resultando no enriquecimento, ou seja, aumento de concentração, dos componentes desejados ou no empobrecimento de outros componentes indesejados como, por exemplo, contaminantes e poluentes.

A maioria dos processos químicos requer a purificação prévia das matérias primas, purificação dos produtos e, eventualmente, contém correntes de reciclo constituídas de reagente não-convertido, como ilustra a FIGURA 1. Todos os processos químicos citados envolvem operações com transferência de massa, dando origem a uma série de equipamentos de separação.

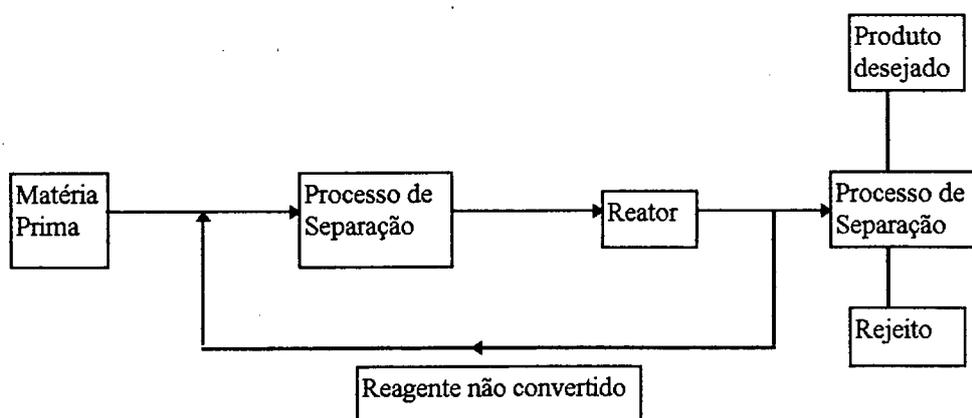


FIGURA 1 - Esquema Geral de um processo químico.

O processo de separação de certos componentes, contidos numa mistura homogênea, utiliza as diferenças de propriedades dos constituintes da mistura para

fazer a separação. Estes processos ou se fundamentam sobre uma diferença na composição das fases em equilíbrio ou sobre uma diferença na taxa de transferência de massa dos constituintes da mistura.

Um processo de separação [7] muito comumente utilizado na indústria química é a destilação. A separação dos componentes está baseada na diferença de volatilidades. Neste processo, o fornecimento de calor a uma mistura líquida dá lugar ao aparecimento de uma fase gasosa que conterà, em maior quantidade, a substância mais volátil que se pretende separar. Por conseguinte, os componentes mais pesados, ou menos voláteis, tenderão a permanecer na fase líquida. Na prática, várias operações consecutivas deste tipo são realizadas, de modo a termos uma separação, a mais completa possível, limitada apenas por considerações econômicas e por características próprias da mistura [1]. Para o estudo ou projeto de otimização de uma unidade de destilação, são necessários principalmente conhecimentos sobre os fenômenos de transporte em geral (transporte de massa, quantidade de movimento e energia).

O transporte de massa por absorção de gás envolve a transferência de um componente solúvel de uma fase gasosa para um absorvente líquido. A transferência de massa em uma coluna de absorção se dá entre um fluxo de um componente gasoso escoando em contracorrente a um fluxo de um componente líquido [33]. Há uma troca entre os componentes envolvidos, onde o líquido absorve uma fração do componente gasoso e o componente gasoso arrasta uma fração do componente líquido. A determinação do coeficiente de transferência de massa entre as duas fases é de grande importância no dimensionamento de colunas de absorção, e essas colunas de absorção podem ter várias aplicações como a purificação do gás de saída de uma chaminé.

Outros processos de separação assim como a evaporação, a cristalização e a secagem envolvem a transferência simultânea de calor e de massa. Na evaporação, uma solução líquida é concentrada pela vaporização de uma parte do solvente. As exigências térmicas são grandes em virtude do calor latente de vaporização do solvente ter que ser fornecido ao sistema. A cristalização é usada industrialmente na fabricação de muitos sais inorgânicos. Pode ser também usada para separar misturas de sais pela cristalização fracionada. E a secagem separa um líquido de um sólido pela vaporização do líquido.

Extensivos dados têm sido obtidos para a transferência de massa entre um fluido em movimento em certas geometrias como por exemplo, placas planas, esferas, e cilindros [28]. Estes dados têm sido obtidos inclusive na sublimação de sólidos, vaporização de líquidos no ar e dissolução de sólidos em água. Para alguns problemas em geometrias simples é possível a obtenção de solução analítica.

Na literatura atual, existe uma grande lacuna na solução de problemas envolvendo escoamentos de fluidos com transferência de massa.

A solução de problemas com transferência de massa envolve a solução da equação da conservação da espécie química. Se, associado ao fenômeno de transferência de massa, ocorrer escoamento de fluidos, a equação da conservação de quantidade de movimento deverá ser resolvida conjuntamente com a equação da conservação da espécie química.

Devido ao forte acoplamento existente entre as equações de conservação e a presença de termos não lineares, é requerida a utilização de métodos numéricos.

A maioria dos métodos numéricos pode ser derivada do método de resíduos

ponderados. A diferença dos vários métodos numéricos está na escolha da função peso. O método das Diferenças Finitas é obtido fazendo-se a função peso igual a delta, centrada no ponto P. O método aproxima os termos da equação diferencial contendo derivadas por suas expressões em Diferenças Finitas; realiza um procedimento puramente matemático sem levar em conta as características físicas do fenômeno que se deseja modelar. Por exemplo, para o problema em que a convecção é dominante, a aproximação dos termos convectivos por diferenças centrais causa oscilações espaciais na solução. O método de Elementos Finitos de Galerkin utiliza a função peso igual as funções tentativas do problema. O método de Volumes Finitos resulta da função peso unitária, e será preferido ao longo deste trabalho porque esta escolha da função peso leva à obtenção de equações discretas que nada mais são do que balanços de conservação sobre os volumes elementares. Existe, portanto, uma razão física para a escolha do método dos Volumes Finitos, pois independentemente do tamanho do volume elementar os princípios de conservação são absolutamente respeitados, o que torna o método atrativo.

O principal objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um algoritmo numérico para a solução de problemas de escoamentos de fluidos com transferência de massa em sistemas bifásicos.

Este trabalho foi dividido em cinco capítulos, sendo seus conteúdos descritos como segue :

CAPÍTULO 2 - Revisão Bibliográfica - Este capítulo contém a revisão bibliográfica destacando as principais contribuições para o desenvolvimento de metodologia numérica a ser aplicada para obtenção da solução de problemas de escoamento de

fluidos com transferência de massa. É descrito o arranjo de variáveis co-localizadas e desencontradas, assim como, algumas funções de interpolação para avaliação das variáveis nas faces do volume de controle em função dos pontos de uma malha computacional e métodos para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

CAPÍTULO 3 - Formulação Utilizada - É apresentada a formulação utilizada, neste capítulo, com as equações de conservação utilizadas em coordenadas generalizadas. A obtenção das equações discretizadas para o método de Volumes Finitos, a função de interpolação e o método de tratamento do acoplamento pressão-velocidade utilizado são apresentados.

CAPÍTULO 4 - Resultados - Os resultados analíticos e numéricos de problemas escolhidos para testar a formulação apresentada no capítulo 3 deste trabalho são apresentados neste capítulo, bem como, o desenvolvimento da solução analítica. É feita uma discussão dos erros obtidos com os resultados numéricos determinados a partir da metodologia proposta, calculados com referência às soluções obtidas analiticamente.

CAPÍTULO 5 - Conclusões e Sugestões - As principais conclusões obtidas neste trabalho são apresentadas, bem como, sugestões para a continuação dos estudos a partir da metodologia proposta.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na solução de problemas por métodos numéricos, tem-se como objetivo a busca de algoritmos que minimizem o tempo computacional, que tenham boas características de convergência e sejam estáveis.

Uma questão de fundamental importância para o sucesso do método numérico é a escolha do sistema de coordenadas para a solução do problema físico de interesse. O uso de coordenadas generalizadas coincidentes com as fronteiras do domínio de cálculo evita a necessidade de interpolações das condições de contorno e possibilita o desenvolvimento de métodos que buscam generalidade, assim como, a solução de problemas que apresentam domínios arbitrários eliminando a dificuldade de solução destes problemas usando sistemas de coordenadas convencionais, e, finalmente, possibilita a concentração da malha onde necessário, sendo possível adaptar as malhas de acordo com o problema físico, reduzindo o número de malhas necessárias e o tempo de computação.

Para o desenvolvimento de algoritmos, os principais passos que devem ser realizados, para solução de problemas de escoamento de fluidos incompressíveis, são :

- a localização das variáveis dependentes na malha
- o tratamento do acoplamento pressão-velocidade
- a obtenção das funções de interpolação entre os pontos discretos
- a solução do sistema de equações lineares

A localização das variáveis dependentes do problema de interesse na malha computacional está relacionada com a escolha de um arranjo de variáveis.

São várias as possibilidades de localização das variáveis na malha computacional, conforme descrito por Shih, Tan e Hwang [24], Silva [25], Ulson de Souza [30] e Maliska [9].

Os arranjos de variáveis na malha computacional mais utilizados são : variáveis co-localizadas e variáveis desencontradas.

No arranjo de variáveis co-localizadas utilizado por Peric et al. [14], Schneider [22], Majumdar [8], Marchi et al. [11] e Ulson de Souza [30], as variáveis de interesse estão localizadas na malha computacional conforme a FIGURA 2.

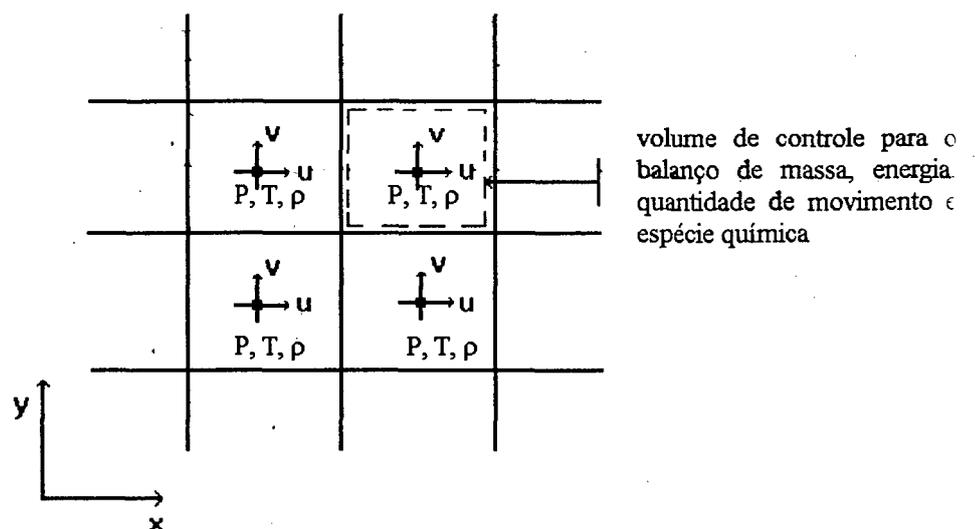


FIGURA 2 - Localização das variáveis na malha computacional para o arranjo de variáveis co-localizadas.

Todas as variáveis dependentes estão armazenadas no mesmo ponto, possuindo todas o mesmo volume elementar.

No balanço de quantidade de movimento unidimensional, exigirá interpolação para a obtenção das velocidades e pressões nas faces do volume de controle, necessárias ao cálculo dos fluxos convectivos e gradiente de pressão, respectivamente.

No balanço de massa, interpolação será necessária para obtenção das velocidades nas faces da célula que serão utilizadas no cálculo dos fluxos mássicos que saem e entram no volume de controle.

A utilização deste esquema, onde todas as variáveis estão armazenadas no mesmo ponto, é de simples implementação computacional, sendo o tratamento do acoplamento pressão-velocidade um fator importante na utilização do arranjo de variáveis co-localizadas devido justamente à disposição das variáveis na malha computacional.

A maioria dos problemas enfrentados, no âmbito dos métodos de solução de problemas utilizando arranjo co-localizado de variáveis, é decorrência do processo de construção da equação para pressão.

Considere o campo de pressões mostrado na FIGURA 3. Fisicamente, o campo mostrado (os números representam valores da pressão) não é consistente mas, pelo fato de todas as variáveis estarem localizadas no mesmo ponto, esta inconsistência não será detectada pela equação de conservação de quantidade de movimento. Para o volume de controle para a velocidade centrada em P, o gradiente de pressão em x, bem como, em y será zero, pois envolve os pontos P_E , P_W , P_N e P_S . Assim, a variação de pressão no domínio (neste caso ondulatório de 0 e 100) não será percebida pelos volumes de controle. Este problema pode ser contornado pela utilização de funções de interpolação mais complexas, que utilizam gradientes de pressão consistentes.

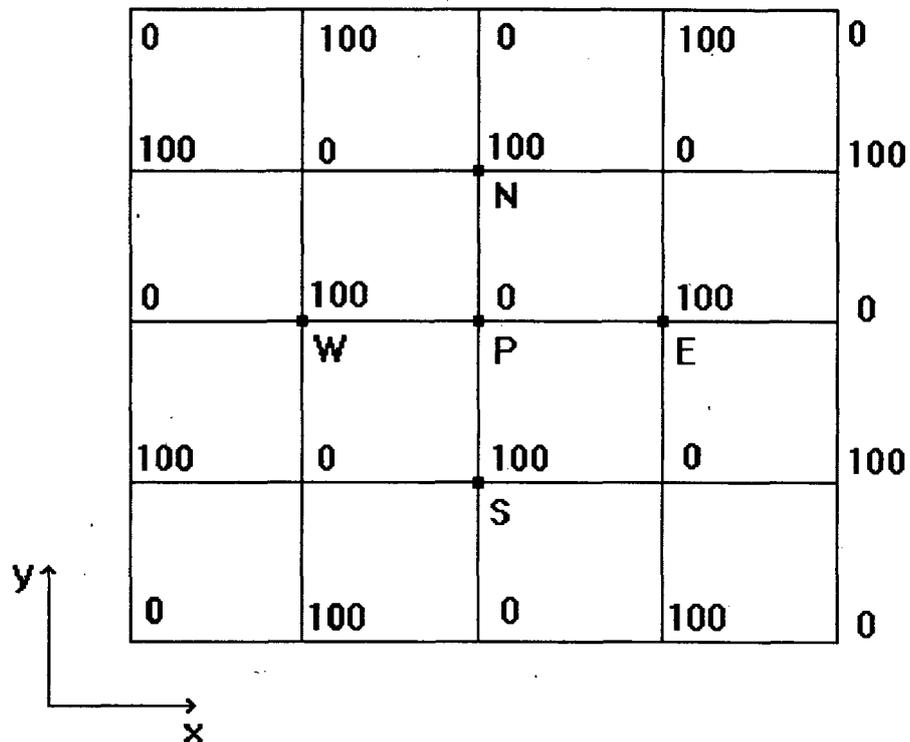


FIGURA 3 - Campo de pressões inconsistente.

No arranjo de variáveis desencontradas, as variáveis de interesse estão localizadas na malha computacional conforme a FIGURA 4, onde as componentes da velocidade estão defasadas em relação a outras variáveis do problema (P , T , ρ , μ , etc.).

No balanço de quantidade de movimento para os volumes de controle (entre os pontos W e P , da FIGURA 4), é necessária a interpolação para obtenção das velocidades em suas faces. Estes volumes de controle já possuem as pressões armazenadas em suas faces (pontos W e P), não necessitando de interpolação para o cálculo do gradiente de pressão.

No balanço de massa (entre as faces w e e , da FIGURA 4), não será necessária nenhuma interpolação pois as velocidades já se encontram armazenadas nas faces

destes volumes de controle.

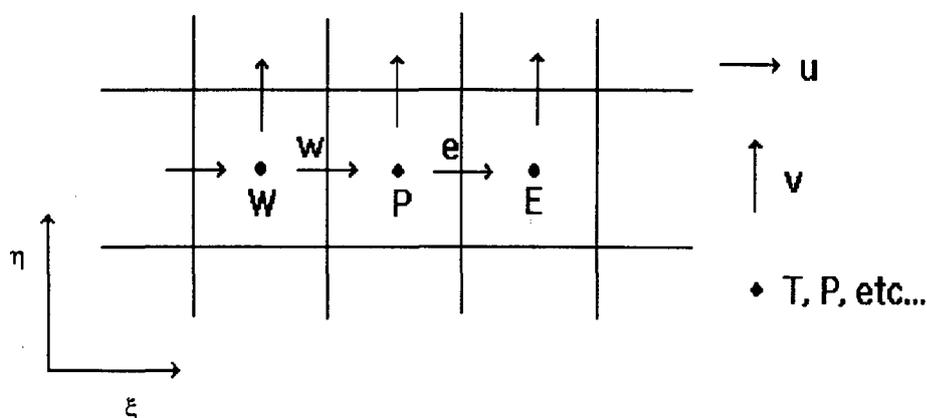


FIGURA 4 - Localização das variáveis na malha computacional para o arranjo de variáveis desencontradas.

O arranjo de variáveis desencontradas, devido à forma como armazena as variáveis no problema, introduz um adequado acoplamento entre a pressão e a velocidade para escoamentos incompressíveis, mas por outro lado necessita de diferentes volumes de controle para as variáveis dependentes. Isto faz com que um número maior de informações geométricas necessitem ser armazenadas e, associado ao armazenamento de um número maior de informações geométricas, está a necessidade de um número maior de operações algébricas, como por exemplo o cálculo dos fluxos de massa nas interfaces do volume de controle. Este número maior de informações geométricas armazenadas e o número maior de operações geométricas acarretam em um maior tempo de computação. Para a solução de problemas tridimensionais o problema é ainda maior. Em suma, a necessidade da utilização de diferentes volumes de controle para as variáveis dependentes, torna a implementação

computacional mais difícil, devido à complexidade no controle dos índices dos respectivos volumes de controle das variáveis.

A avaliação da propriedade ϕ e de suas derivadas nas faces dos volumes de controle faz-se necessária para a solução da equação resultante discretizada do Método de Volumes Finitos. No entanto, os valores das propriedades ϕ e de suas derivadas são armazenados nos centros dos volumes de controle.

Para um melhor entendimento, considere, por exemplo, a face leste do volume de controle centrado em P na FIGURA 5.

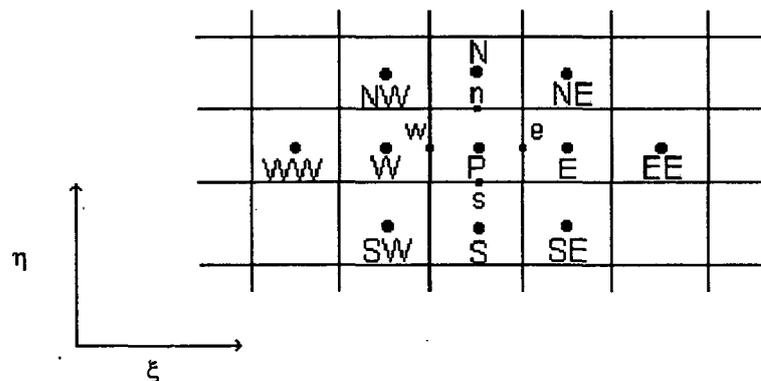


FIGURA 5 - Volume de controle centrado em P e seus vizinhos.

Quer-se expressar ϕ na face leste em função dos valores de ϕ nos centros dos volumes vizinhos. Para isto deve-se escolher uma função para interpolar o valor de ϕ na face leste em função, por exemplo, dos valores de ϕ_E e ϕ_P .

Certos tipos de função de interpolação podem dificultar a convergência do processo iterativo de solução ou mesmo provocar a divergência, mas por outro lado,

algumas funções de interpolação que promovem a estabilidade do processo iterativo acelerando a convergência podem ser prejudiciais para a qualidade da solução.

O esquema mais simples para a avaliação de ϕ na face leste é assumir uma interpolação linear entre ϕ_E e ϕ_P , dada por

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (1)$$

O mesmo esquema da interpolação linear é um caso particular de um esquema mais geral, o esquema híbrido, em que ϕ_e é avaliado através de

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \phi_E \quad (2)$$

onde $\bar{\alpha}$ é um parâmetro que pode assumir valores entre -0.5 e +0.5. Para $\bar{\alpha}=0$, a equação (2) é uma interpolação linear igual a equação (1). A vantagem da forma apresentada na equação (2) é que na realidade a mesma pode representar uma série de esquemas de interpolação. Esquemas mais sofisticados para a avaliação de ϕ_e podem envolver o valor de ϕ em outros volumes além de E e P. O esquema de interpolação WUDS [16] é unidimensional, ou seja, o valor de ϕ_e é estimado empregando-se apenas valores de ϕ localizados sobre uma linha paralela à malha computacional. O esquema WUDS avalia $\bar{\alpha}$ baseado na solução de um problema unidimensional de convecção e difusão.

A aproximação das derivadas espaciais das equações diferenciais por diferenças centrais (CDS) resulta em esquemas de segunda ordem. Em situações de escoamentos com elevados números de Reynolds e Peclet, que são a maioria dos problemas práticos da engenharia, o esquema de diferenças centrais causa oscilações na solução ou mesmo divergência. A utilização de diferenças centrais é satisfatória para solução de problemas que envolvem somente difusão ou para problemas com baixos números de Reynolds ou Peclet.

Esquemas "upwind" (UDS), ou seja, esquemas que usam informações a montante apenas, geram coeficientes positivos na equação discretizada e produzem soluções livres de oscilações. Os cálculos utilizando esquemas "upwind" frequentemente sofrem grandes imprecisões devido à falsa difusão, ou difusão numérica, resultante de erros de truncamento, existência de termo fonte, presença de gradientes da variável dependente normais à linha de corrente e inclinação do vetor velocidade relativamente à malha.

Spalding [27] desenvolveu um esquema híbrido, visando agrupar as vantagens dos esquemas CDS e UDS. Baseando-se neste trabalho, foi proposto o esquema exponencial (EDS) [19] que, quando usado para o estudo de problemas unidimensionais, garante produzir a solução exata para qualquer valor de número de Peclet e para qualquer número de pontos na malha. Este esquema não é amplamente usado devido ao seu custo elevado de computação e porque o esquema não é exato para situações bi e tri-dimensionais e fontes diferente de zero.

Outro esquema de interpolação bastante divulgado é o esquema "power law" proposto por Patankar [12]. A utilização da função de interpolação "power law" em

esquemas numéricos não envolve um grande custo computacional e ele apresenta uma boa representação para comportamentos exponenciais.

Ulson de Souza [29] propõe o esquema WUDS-E, que é uma extensão do esquema WUDS, o qual considera o efeito dos termos difusivo e convectivo na direção normal, bem como, termos de pressão e fonte, para avaliação das variáveis nas faces do volume de controle, os quais são desprezados nos esquemas híbridos.

Nos esquema SUDS e SWUDS, proposto por Raithby [17], para a avaliação de ϕ_e na FIGURA 5, podem participar os valores de ϕ nos volumes centrados em S, P, N, NE, E e SE dependendo da orientação do vetor velocidade em relação a malha. No esquema "skew upwind", proposto por Raithby [17], procura-se minimizar erros devido ao não alinhamento do vetor velocidade com as linhas da malha.

Ulson de Souza [30] propõe uma função de interpolação, denominada de função de interpolação completa (FIC), originária da própria equação diferencial que se deseja resolver. Esta função de interpolação possui a dimensionalidade que o problema requer e contém todas as influências físicas presentes na equação diferencial a ser resolvida. Apesar do esquema FIC ser bidimensional, é de difícil implementação.

Dentre os acoplamentos presentes nas equações de Navier-Stokes o acoplamento entre a pressão e a velocidade é o mais delicado. Para escoamentos incompressíveis, este assunto recebeu uma enorme atenção nas duas últimas décadas, resultando no desenvolvimento de muitos métodos bastante empregados atualmente, dos quais são citados neste trabalho os métodos SIMPLE [13], SIMPLER [12], PRIME [9] e SIMPLEC [32].

Praticamente em todos estes métodos a sequência de cálculo envolve dois passos distintos: no primeiro, as velocidades são corrigidas de maneira a satisfazer a equação da conservação da massa e no segundo, as pressões são avançadas para completar aquele ciclo iterativo.

Um dos métodos mais utilizados e do qual derivaram muitos outros é o método SIMPLE, desenvolvido por Patankar e Spalding [13] onde a pressão é escrita como a soma da melhor estimativa da pressão disponível, P' , mais a correção P'' , que é calculada de maneira a satisfazer a equação da conservação da massa.

O método SIMPLER [12] busca uma nova maneira de calcular o campo de pressões em cada iteração, procurando conectar o cálculo do campo de pressões com as equações que governam o fenômeno. Para calcular a pressão, as equações da conservação da quantidade de movimento, nas direções x e y, são escritas na seguinte forma

$$u_p = \hat{u}_p - \frac{\Delta V}{a_p^u} \frac{\Delta P}{\Delta x} \quad (3)$$

$$v_p = \hat{v}_p - \frac{\Delta V}{a_p^v} \frac{\Delta P}{\Delta y} \quad (4)$$

As velocidades \hat{u}_p e \hat{v}_p são obtidas algebricamente utilizando as mais recentes velocidades calculadas.

Procurando-se obter um campo de pressões que satisfaça as equações da conservação da quantidade de movimento e da conservação da massa, as equações (3)

e (4) são introduzidas na equação da conservação da massa para obter uma equação para a pressão.

No método PRIME [9], a estrutura iterativa é bastante simplificada realizando-se os dois passos (correção da velocidade e cálculo da pressão) em apenas um. Este método tem como atrativo a eliminação da solução de duas equações de Poisson, necessárias no método SIMPLER [12]. Isto é conseguido utilizando-se as equações da conservação da quantidade de movimento (3) e (4) não só para o cálculo da pressão mas também para a correção da velocidade, tornando desnecessária a obtenção do campo P' de pressões para corrigir o campo de velocidade. No método PRIME não há mais a necessidade de resolver sistemas de equações para obter as velocidades. As velocidades são avançadas durante o ciclo iterativo de uma maneira semelhante ao método de Jacobi. Apenas uma equação de Poisson é resolvida em cada iteração.

Outro método para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade é o método SIMPLEC, proposto por Van Doormal e Raithby [32]. Neste método o tratamento do acoplamento é realizado em dois passos, isto é, o passo onde ρ , U e V são corrigidos para satisfazer a equação da conservação da massa e o passo onde o novo campo de pressões é calculado via $P = P^* + P'$. No método SIMPLEC [32], as equações de correção da velocidade são equações quaisquer que não interferem na solução final mas apenas na taxa de convergência. Este método é descrito no Capítulo 3.

FORMULAÇÃO UTILIZADA

Serão apresentadas, neste capítulo, as equações governantes, escritas no sistema de coordenadas cartesianas, a transformação destas equações para o sistema de coordenadas generalizadas, bem como, a equação discretizada do método de Volumes Finitos. Será apresentada, ainda, a função interpolação utilizada e o tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

3.1 - EQUAÇÕES GOVERNANTES

As equações governantes dos problemas envolvendo escoamento de fluidos, com transferência de massa são as equações de conservação da massa, conservação de quantidade de movimento e conservação da espécie química.

A equação da conservação da massa é dada por

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0 \quad (5)$$

A equação da conservação de quantidade de movimento pode ser expressa como

$$\rho \frac{D\vec{V}}{Dt} = \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \vec{B} \quad (6)$$

onde \vec{B} é o vetor dado pelas forças externas, por unidade de volume de fluido e $\vec{\tau}$ é o tensor tensão.

A equação da conservação da espécie química é dada por

$$\rho \frac{DW_A}{Dt} = \rho D_{AB} \nabla^2 W_A + r_A''' \quad (7)$$

onde D_{AB} é a difusividade do componente A no componente B e r_A''' é a taxa mássica de reação química, por unidade de volume de fluido.

A equação constitutiva para Fluido Newtoniano pode ser expressa como

$$\tau_{ij} = -\delta_{ij}P + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \delta_{ij} \left(\lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{V} \right) \quad (8)$$

onde λ , dado pela hipótese de Stokes, é igual a $\frac{2}{3}\mu$, δ_{ij} é igual à unidade quando i for igual a j e δ_{ij} é igual a zero, quando i for diferente de j.

Para obter a solução das equações (5), (6) e (7) é necessário escolher um sistema de coordenadas.

As equações de conservação (5), (6) e (7) serão escritas no sistema de coordenadas cartesianas, considerando-se o fluido newtoniano, com escoamento laminar e bidimensional, sendo as propriedades físicas do fluido constantes, tais como, massa específica, viscosidade, etc. O sistema em estudo será considerado binário.

As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química, escritas no sistema de coordenadas cartesianas, são dadas por

Equação da Conservação da Massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (9)$$

Equação da Conservação de Quantidade de Movimento na direção x :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uu) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vu) = & -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{2}{3}\mu(\vec{\nabla} \cdot \vec{V})\right) \end{aligned} \quad (10)$$

Equação da Conservação de Quantidade de Movimento na direção y :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vv) = & -\frac{\partial P}{\partial y} + \rho g_y + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu \frac{\partial u}{\partial y}\right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu \frac{\partial v}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{2}{3}\mu(\vec{\nabla} \cdot \vec{V})\right) \end{aligned} \quad (11)$$

Equação da Conservação da Espécie Química A :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho W_A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u W_A) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v W_A) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D_{AB} \frac{\partial W_A}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\rho D_{AB} \frac{\partial W_A}{\partial y}\right) + r_A''' \quad (12)$$

3.2 - TRANSFORMAÇÃO DAS EQUAÇÕES

As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química são escritas, para uma variável genérica ϕ , como

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) + P^\phi = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + S^\phi \quad (13)$$

onde as variáveis ϕ , P^ϕ , S^ϕ e Γ^ϕ possuem expressões específicas em cada uma das equações de conservação. A equação se reduz à equação da conservação da massa quando S^ϕ e P^ϕ forem iguais a zero e $\phi=1$. As componentes da equação da conservação da quantidade de movimento na direções x e y são obtidas fazendo-se ϕ igual a u e v , respectivamente, com os termos fonte e de pressão apropriados. O termo P^ϕ representa o gradiente de pressão. A variável Γ^ϕ é o coeficiente de transporte que é dado pelo produto entre a difusividade relativa à variável ϕ e a massa específica do fluido. A equação da conservação da espécie química é obtida fazendo-se ϕ igual a W_A , com o termo fonte igual a taxa de reação química (r_A'''), com P^ϕ igual a zero.

O QUADRO 1 mostra os valores de ϕ , Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ para diversas equações de conservação no caso bidimensional.

O conjunto formado pelas equações (9), (10), (11) e (12) é utilizado para elaboração do algoritmo envolvendo variáveis co-localizadas.

Estas equações e a equação de estado para um gás ideal formam um conjunto de cinco equações a cinco incógnitas (u , v , P , W_A e ρ), que quando submetidas às condições de contorno e condições iniciais, completam a formulação do problema. As equações (9),(10),(11) e (12) são adequadas para resolver problemas definidos em geometrias do tipo mostrado na FIGURA 6.

QUADRO 1 - Valores de ϕ , Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ para as diversas equações de conservação

| Equação da Conservação | ϕ | Γ^ϕ | P^ϕ | S^ϕ |
|------------------------------|--------|---------------|---------------------------------|--|
| Massa | 1 | 0 | 0 | 0 |
| Quantidade de Movimento em x | u | μ | $\frac{\partial P}{\partial x}$ | $\rho g_x - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{2}{3} \mu (\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right]$ |
| Quantidade de Movimento em y | v | μ | $\frac{\partial P}{\partial y}$ | $\rho g_y - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{2}{3} \mu (\vec{\nabla} \cdot \vec{V}) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right]$ |
| Espécie Química | W_A | ρD_{AB} | 0 | r_A''' |

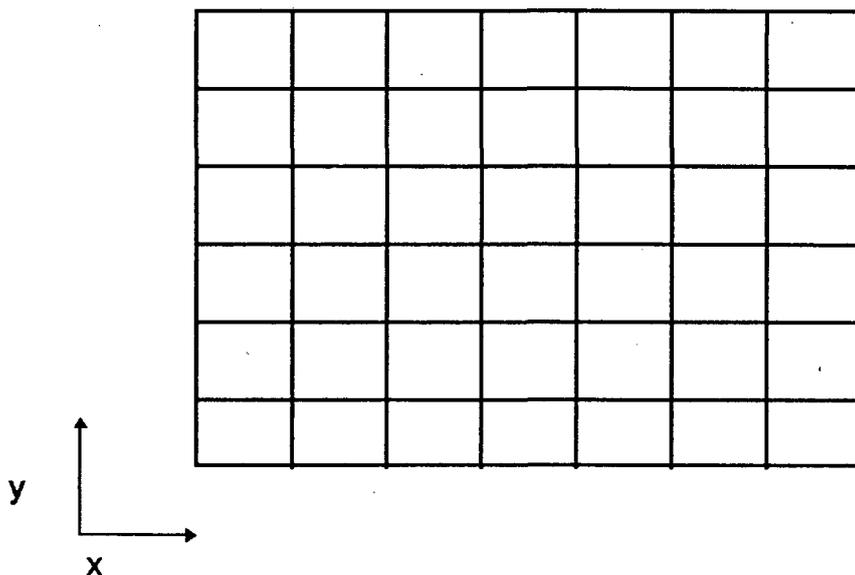


FIGURA 6 - Geometria adequada ao sistema cartesiano.

A solução das equações de conservação, escritas no sistema cartesiano de coordenadas, utilizando-se a discretização cartesiana, poderá apresentar sérios problemas quando da aplicação das condições de contorno, uma vez que as fronteiras dos volumes de controle podem não ser coincidentes com a fronteira do problema físico em questão. O programa computacional, com as equações escritas no sistema cartesiano de coordenadas, ficará extremamente dependente da geometria do problema.

Visando a obtenção de uma maior flexibilidade da formulação para o tratamento de problemas em geometrias mais complexas do que a apresentada na FIGURA 6, surge a necessidade de transformar as equações de forma a serem adequadas para resolver problemas com geometrias semelhantes ao tipo mostrado na FIGURA 7.

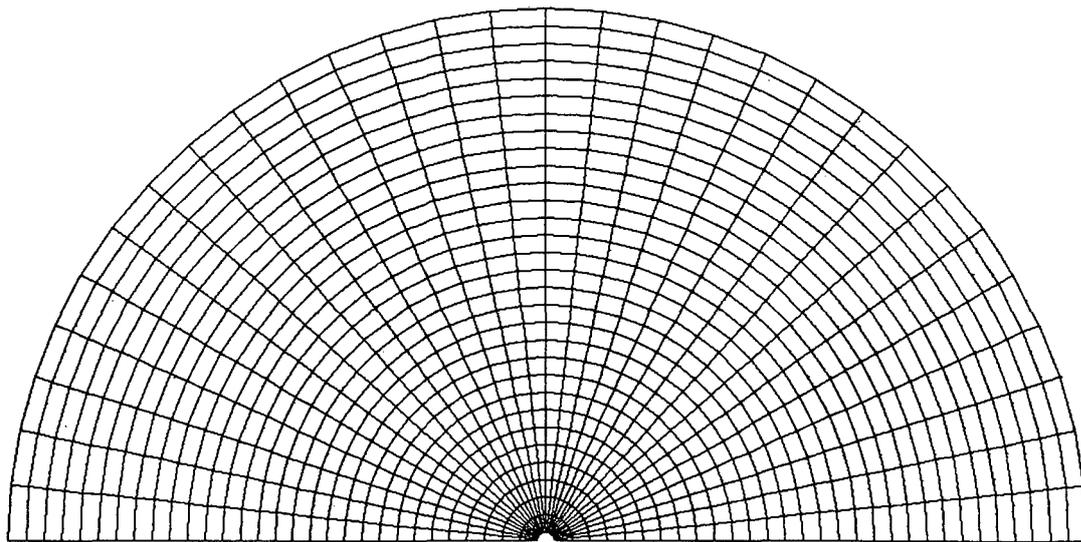


FIGURA 7 - Geometria de forma não cartesiana.

A equação de conservação escrita, para uma variável genérica ϕ , no sistema cartesiano de coordenadas, é transformada para o sistema de coordenadas

generalizadas (ξ, η) , que se adaptam à fronteira. Esta transformação é feita utilizando-se a regra da cadeia.

Para uma função ϕ qualquer, temos

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x_i} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} \quad (14)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y_i} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y_i} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y_i} \quad (15)$$

Derivadas de maior ordem são obtidas por aplicações sucessivas das equações (14) e (15).

Empregando-se a seguinte transformação :

$$\xi = \xi(x, y) \quad (16)$$

$$\eta = \eta(x, y) \quad (17)$$

ou

$$x = x(\xi, \eta) \quad (18)$$

$$y = y(\xi, \eta) \quad (19)$$

na equação (13), executando-se as simplificações e agrupamento necessários, são obtidas as equações bi-dimensionais em coordenadas generalizadas que, de forma genérica, podem ser expressas por

$$\begin{aligned} & \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{J} (\xi_x \rho u \phi + \xi_y \rho v \phi) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{1}{J} (\eta_x \rho u \phi + \eta_y \rho v \phi) \right] + \frac{P^\phi}{J} = \\ & = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{J} \left(\xi_x \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} + \xi_y \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{1}{J} \left(\eta_x \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} + \eta_y \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] + \frac{S^\phi}{J} \end{aligned} \quad (20)$$

Os elementos da matriz jacobiana da transformação são as métricas da transformação, e o determinante da matriz é o jacobiano da transformação, que pode ser dado por

$$J = \begin{vmatrix} \xi_x & \xi_y \\ \eta_x & \eta_y \end{vmatrix} = \xi_x \eta_y - \eta_x \xi_y \quad (21)$$

A determinação destas grandezas é necessária para solução das equações de conservação.

O inverso do jacobiano é dado por

$$J^{-1} = \begin{vmatrix} x_\xi & x_\eta \\ y_\xi & y_\eta \end{vmatrix} = x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi \quad (22)$$

e,

$$J = \frac{1}{J^{-1}} \quad (23)$$

Pela aplicação do teorema fundamental da função inversa, podem obter-se as relações dadas pelas equações (24), (25), (26) e (27)

$$\xi_x = y_\eta J \quad (24)$$

$$\xi_y = -x_\eta J \quad (25)$$

$$\eta_x = -y_\xi J \quad (26)$$

$$\eta_y = x_\xi J \quad (27)$$

Reescrevendo-se a equação (20), obtém-se

$$\frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U \phi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V \phi) + \hat{P}^\phi = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] + \hat{S}^\phi \quad (28)$$

onde,

$$\hat{P}^\phi = \frac{P^\phi}{J} \quad (29)$$

e,

$$\hat{S}^\phi = \frac{S^\phi}{J} \quad (30)$$

As componentes contravariantes do vetor velocidade, sem normalização métrica, U e V , são representadas em função das velocidades cartesianas, por

$$U = uy_\eta - vx_\eta \quad (31)$$

$$V = vx_\xi - uy_\xi \quad (32)$$

Os coeficientes C_1 , C_2 e C_3 são os coeficientes de transporte transformados, expressos por

$$C_1 = \Gamma^\phi J \alpha \quad (33)$$

$$C_2 = -\Gamma^\phi J \beta \quad (34)$$

$$C_3 = \Gamma^\phi J \gamma \quad (35)$$

onde α , β e γ são as componentes do tensor métrico da transformação, dadas por

$$\alpha = x_\eta^2 + y_\eta^2 \quad (36)$$

$$\beta = x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta \quad (37)$$

$$\gamma = x_\xi^2 + y_\xi^2 \quad (38)$$

As expressões transformadas dos termos de pressão são dadas por

$$\hat{P}^u = \frac{\partial P}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial P}{\partial \eta} y_\xi \quad (39)$$

$$\hat{P}^v = \frac{\partial P}{\partial \eta} x_\xi - \frac{\partial P}{\partial \xi} x_\eta \quad (40)$$

Transformando-se as equações da conservação de massa, quantidade de movimento e espécie química, para o novo sistema de coordenadas (ξ, η) , obtém-se

Equação da Conservação da Massa:

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V) = 0 \quad (41)$$

Equação da Conservação de Quantidade de Movimento na direção x :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V u) = - \frac{\partial P}{\partial \xi} y_\eta + \frac{\partial P}{\partial \eta} y_\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial u}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial u}{\partial \xi} \right] + \hat{S}^u \end{aligned} \quad (42)$$

Equação da Conservação de Quantidade de Movimento na direção y :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U v) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V v) = - \frac{\partial P}{\partial \eta} x_\xi + \frac{\partial P}{\partial \xi} x_\eta + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial v}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial v}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial v}{\partial \xi} \right] + \hat{S}^v \end{aligned} \quad (43)$$

Equação da Conservação da Espécie Química A :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho W_A) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U W_A) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V W_A) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial W_A}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial W_A}{\partial \eta} \right] + \\ + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial W_A}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial W_A}{\partial \xi} \right] + \widehat{S}^{W_A} \end{aligned} \quad (44)$$

Estas equações, escritas no novo sistema de coordenadas (ξ, η) , tornam o programa computacional não dependente da geometria do problema.

A solução do conjunto de equações de conservação é feita utilizando-se o método de Volumes Finitos.

3.3 - DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES :

A equação (28), escrita no sistema de coordenadas cartesianas e transformada para o sistema de coordenadas generalizadas (ξ, η) , é utilizada para obtenção da equação discretizada, através da realização de uma integração espacial e temporal sobre os diversos volumes elementares, obtendo-se, assim, uma equação para cada volume de controle.

As equações da conservação são integradas ao longo de um volume de controle delimitado por duas linhas de ξ constante e duas linhas de η constante, como mostra a FIGURA 8. É realizada, ainda, uma integração temporal, ao longo do intervalo de tempo, Δt .

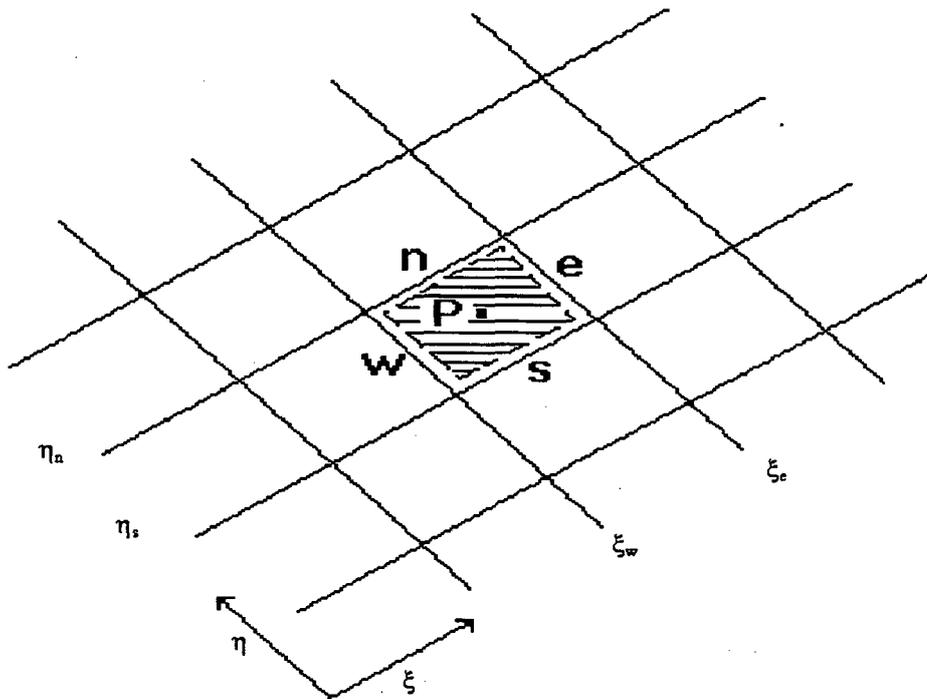


FIGURA 8 - Volume de controle genérico para integração.

A equação resultante é expressa por

$$\begin{aligned}
 & \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \frac{1}{J} \left\{ [\rho\phi]^{t+\Delta t} - [\rho\phi]^t \right\} d\eta d\xi + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ [\rho U\phi]_e - [\rho U\phi]_w \right\} d\eta dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ [\rho V\phi]_n - [\rho V\phi]_s \right\} d\xi dt + \\
 & \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ \bar{P}\phi - \bar{S}\phi \right\} d\eta d\xi dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ \left[C_1 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_e - \left[C_1 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \right]_w \right\} d\eta dt + \\
 & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ \left[C_3 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_n - \left[C_3 \frac{\partial\phi}{\partial\eta} + C_2 \frac{\partial\phi}{\partial\xi} \right]_s \right\} d\xi dt \quad (45)
 \end{aligned}$$

onde Δt é o intervalo de tempo arbitrado. Os termos entre colchetes podem ser representados, para as faces leste e norte, por

$$\left(\Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right) \Big|_e = \left[C_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right]_e + \left[C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_e \quad (46)$$

$$\left(\Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right) \Big|_n = \left[C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right]_n + \left[C_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_n \quad (47)$$

onde \bar{n} representa a direção normal às faces do volume de controle.

Substituindo-se as equações (46) e (47) na equação (45), resulta

$$\begin{aligned} & \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \frac{1}{J} \left\{ [\rho\phi]^{t+\Delta t} - [\rho\phi]^t \right\} d\eta d\xi + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ [\rho U\phi]_e - [\rho U\phi]_w \right\} d\eta dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ [\rho V\phi]_n - [\rho V\phi]_s \right\} d\xi dt + \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ [\hat{P}^\phi - \hat{S}^\phi] \right\} d\eta d\xi dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{\eta_s}^{\eta_n} \left\{ \left[\Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_e + \left[\Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_w \right\} d\eta dt + \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \int_{\xi_w}^{\xi_e} \left\{ \left[\Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_n + \left[\Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} \right]_s \right\} d\xi dt \end{aligned} \quad (48)$$

Para resolver esta integração são admitidas as seguintes hipóteses :

- ① os fluxos de massa nas faces e, w, n e s são uniformes ao longo de cada face.
- ② ϕ na face e sua derivada normal à face, as métricas, Γ^ϕ e a pressão na face são uniformes ao longo de cada face.
- ③ todos os termos, exceto $\rho\phi$, são constantes ao longo de Δt e são avaliados em $t+\Delta t$, o que implica em uma formulação totalmente implícita.
- ④ $(\rho\phi)$ e \hat{S}^ϕ são constantes no volume de controle.

Realizando-se a integração da equação (48), com as hipóteses enumeradas acima, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\dot{m}_p \phi_p - \dot{m}_p^o \phi_p^o}{\Delta t} + \dot{m}_{fe} \phi_e - \dot{m}_{fw} \phi_w - \dot{m}_{fs} \phi_s + \dot{m}_{fn} \phi_n = & \left\{ \left[\Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{n}} \right]_e + \left[\Gamma^\phi \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{n}} \right]_w \right\} \Delta \eta + \\ & + \left\{ \left[\Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{n}} \right]_s + \left[\Gamma^\phi \sqrt{\gamma} \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{n}} \right]_n \right\} \Delta \xi + \left\{ L[\hat{S}_p^\phi] - L[\hat{P}_p^\phi] \right\} \Delta \xi \Delta \eta \end{aligned} \quad (49)$$

com \dot{m}_{fi} igual ao fluxo de massa na face i dado por :

$$\dot{m}_{fe} = (\rho U)_e \Delta \eta \quad (50)$$

$$\dot{m}_{fw} = (\rho U)_w \Delta \eta \quad (51)$$

$$\dot{m}_{fs} = (\rho V)_s \Delta \xi \quad (52)$$

$$\dot{m}_{fn} = (\rho V)_n \Delta \xi \quad (53)$$

O fluxo de massa no ponto P pode ser expresso por :

$$\dot{m}_p = \frac{\rho_p \Delta \xi \Delta \eta}{J_p} \quad (54)$$

e os termos de pressão, transformados, são escritos como,

$$L[\hat{P}_p^u] = \frac{[(Py_\eta)_e - (Py_\eta)_w]}{\Delta \xi} + \frac{[(Py_\xi)_s - (Py_\xi)_n]}{\Delta \eta} \quad (55)$$

$$L[\hat{P}_p^v] = \frac{[(Px_\xi)_n - (Px_\xi)_s]}{\Delta \eta} + \frac{[(Px_\eta)_w - (Px_\eta)_e]}{\Delta \xi} \quad (56)$$

Para avaliação da pressão nas faces do volume de controle, será feita uma interpolação linear.

Para o cálculo do termo de convecção da propriedade ϕ através das faces do volume de controle, é necessário conhecer o valor de ϕ na interface de interesse, assim como, o gradiente de ϕ . Os valores de ϕ são conhecidos no centro dos volumes elementares e, portanto, funções de interpolação devem ser assumidas, sendo a função de interpolação WUDS, uma das mais usadas. A função interpolação WUDS será utilizada ao longo deste trabalho.

O valor da propriedade ϕ , nas faces do volume de controle, será obtida utilizando-se o esquema WUDS, proposto por Raithby [16], que fornece

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \phi_E \quad (57)$$

$$\phi_w = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_w \right) \phi_P \quad (58)$$

$$\phi_n = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_n \right) \phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) \phi_N \quad (59)$$

$$\phi_s = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) \phi_S + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_s \right) \phi_P \quad (60)$$

Para a aproximação do gradiente de ϕ na interface, são utilizadas as seguintes expressões :

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_e = \bar{\beta}_e \left(\frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi} \right) \quad (61)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_w = \bar{\beta}_w \left(\frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta \xi} \right) \quad (62)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_n = \bar{\beta}_n \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta \eta} \right) \quad (63)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_s = \bar{\beta}_s \left(\frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta \eta} \right) \quad (64)$$

e,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{\phi_{NE} + \phi_N - \phi_{SE} - \phi_S}{4\Delta \eta} \quad (65)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_w = \frac{\phi_{NW} + \phi_N - \phi_{SW} - \phi_S}{4\Delta \eta} \quad (66)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\phi_{NE} + \phi_E - \phi_{NW} - \phi_W}{4\Delta \xi} \quad (67)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{\phi_{SE} + \phi_E - \phi_{SW} - \phi_W}{4\Delta \xi} \quad (68)$$

onde $\bar{\alpha}$ e $\bar{\beta}$ são os coeficientes que dependerão do problema físico e apresentarão variação dentro do domínio de solução. Os coeficientes $\bar{\alpha}$ e $\bar{\beta}$ são função da característica convectiva/difusiva do problema, e são dados conforme Raithby [16],

$$\bar{\alpha} = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2} \quad (69)$$

$$\bar{\beta} = \frac{(1 + 0.005Pe^2)}{(1 + 0.05Pe^2)} \quad (70)$$

Substituindo-se as aproximações de ϕ e das derivadas de ϕ nas faces leste, oeste, norte e sul, na equação (49), obtém-se

$$a_P^\phi \phi_P = a_e^\phi \phi_E + a_w^\phi \phi_W + a_n^\phi \phi_N + a_s^\phi \phi_S + a_{ne}^\phi \phi_{NE} + a_{se}^\phi \phi_{SE} + a_{nw}^\phi \phi_{NW} + a_{sw}^\phi \phi_{SW} + b_P^\phi \quad (71)$$

onde

$$a_P^\phi = \frac{m_P^\circ}{\Delta t} + a_e^\phi + a_w^\phi + a_n^\phi + a_s^\phi \quad (72)$$

$$a_w^\phi = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \dot{m}_w + D_1 \left. \frac{\bar{\beta}_w}{\Delta \xi} - \frac{D_4}{4\Delta \xi} \right|_n + \left. \frac{D_4}{4\Delta \xi} \right|_s \quad (73)$$

$$a_e^\phi = -\left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \dot{m}_e + D_1 \left. \frac{\bar{\beta}_e}{\Delta \xi} + \frac{D_4}{4\Delta \xi} \right|_n - \left. \frac{D_4}{4\Delta \xi} \right|_s \quad (74)$$

$$a_n^\phi = -\left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n \right) \dot{m}_n + D_3 \left. \frac{\bar{\beta}_n}{\Delta \eta} + \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_e - \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_w \quad (75)$$

$$a_s^\phi = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s \right) \dot{m}_s + D_3 \left. \frac{\bar{\beta}_s}{\Delta \eta} - \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_e + \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_w \quad (76)$$

$$a_{ne}^\phi = \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_e + \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_n \quad (77)$$

$$a_{nw}^\phi = -\left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_w - \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_n \quad (78)$$

$$a_{se}^\phi = -\left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_e - \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_s \quad (79)$$

$$a_{sw}^\phi = \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_w + \left. \frac{D_2}{4\Delta \eta} \right|_s \quad (80)$$

$$b_P^\phi = \frac{\Delta V}{J} L[P_P^\phi] + \frac{\Delta V}{J} L[S_P^\phi] + \frac{m_P^\circ \phi_P^\circ}{\Delta t} \quad (81)$$

e,

$$D_1 = (\Gamma^\phi J \alpha) \Delta \eta \quad (82)$$

$$D_2 = (\Gamma^{\phi} J \beta) \Delta \eta \quad (83)$$

$$D_3 = (\Gamma^{\phi} J \gamma) \Delta \xi \quad (84)$$

$$D_4 = (\Gamma^{\phi} J \beta) \Delta \xi \quad (85)$$

3.4 - TRATAMENTO DO ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE

Para a obtenção da solução das equações de conservação apresentadas, é necessária a escolha de um método para tratamento do acoplamento pressão-velocidade. Neste trabalho é utilizado o método SIMPLEX, proposto por Van Doormaal e Raithby [32], para o tratamento do acoplamento pressão-velocidade.

O método SIMPLEX, aplicado ao arranjo de variáveis co-localizadas, é utilizado para a obtenção da equação para a correção da pressão.

A equação da conservação da quantidade de movimento na direção x pode ser escrita na forma

$$a_p u_p = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} + b_p^u - L[\hat{P}_p]^u \quad (86)$$

Com um campo de pressões estimado, P^* , pode-se resolver a equação da conservação da quantidade de movimento dada por

$$a_p u_p^* = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB}^* + b_p^u - L[\hat{P}_p^*]^u \quad (87)$$

obtendo-se as componentes do vetor velocidade u^* . As componentes da velocidade u^* são estimativas do campo de velocidades que, se conhecido o campo de pressões,

estas velocidades satisfariam a equação da conservação da massa. Normalmente o campo de pressões não é conhecido, sendo necessária uma correção da pressão estimada, $P' = P - P^*$, para corrigir o campo de u^* através de $u' = u - u^*$. A relação entre P' e u' é obtida, subtraindo-se a equação (87) da equação (86), obtendo-se

$$a_p u'_p = \sum_{nb} a_{nb} u'_{NB} - L[\hat{P}'_p]^u \quad (86)$$

Os campos de pressão, P , e da componente de velocidade, u , que satisfazem a equação da conservação da massa e da quantidade de movimento, na direção x , são

$$u_p = u_p^* + u'_p \quad (89)$$

$$P_p = P_p^* + P'_p \quad (90)$$

Subtraindo-se, de ambos os lados da equação (88), o termo $\sum_{nb} a_{nb} u'_p$, obtém-se

$$\left(a_p - \sum_{nb} a_{nb} \right) u'_p = \sum_{nb} a_{nb} (u'_{NB} - u'_p) - L[\hat{P}'_p]^u \quad (91)$$

No método SIMPLIC, o termo $\sum_{nb} a_{nb} (u'_{NB} - u'_p)$, da equação (91), é desprezado.

A expressão para correção da velocidade resulta em

$$u'_p = - \frac{1}{\left(a_p - \sum_{nb} a_{nb} \right)} L[\hat{P}'_p]^u \quad (92)$$

ou ainda,

$$u'_p = -d_p^u L[\hat{P}'_p]^u \quad (93)$$

onde

$$d_p^u = \frac{1}{\left(a_p - \sum_{nb} a_{nb} \right)} \quad (94)$$

Expressão análoga à equação (92) pode ser escrita para correção da componente da velocidade na face leste do volume de controle, u'_e ,

$$u'_e = -d_e^u L[\hat{P}'_e]^u \quad (95)$$

onde

$$d_e^u = \frac{d_P^u + d_E^u}{2} \quad (96)$$

Substituindo-se u'_e por $u_e - u_e^*$, na equação (95), obtém-se

$$u_e = u_e^* - d_e^u L[P'_e]^u \quad (97)$$

Para a componente de velocidade, v_e , pode escrever-se que

$$v_e = v_e^* - d_e^v L[P'_e]^v \quad (98)$$

onde os termos $L[\hat{P}'_e]^u$ e $L[\hat{P}'_e]^v$ são dados por :

$$L[\hat{P}'_e]^u = y_{\eta}|_e (P'_B - P'_P) - \frac{y_{\xi}|_e (P'_{NE} + P'_N)}{4} + \frac{y_{\xi}|_e (P'_S + P'_{SE})}{4} \quad (99)$$

$$L[\hat{P}'_e]^v = \frac{x_{\xi}|_e}{4} \{ (P'_N + P'_{NE}) - (P'_S + P'_{SE}) \} - x_{\eta}|_e (P'_B - P'_P) \quad (100)$$

A componente contravariante da velocidade, U_e , pode ser expressa por

$$U_e = U_e^* - d_e^u \left\{ L[\hat{P}'_e]^u y_{\eta}|_e - L[\hat{P}'_e]^v x_{\eta}|_e \right\} \quad (101)$$

onde

$$U_e^* = u_e^* y_{\eta}|_e - v_e^* x_{\eta}|_e \quad (102)$$

A equação da conservação da massa pode ser dada como

$$(\rho U)_e - (\rho U)_w + (\rho V)_n - (\rho V)_s = 0 \quad (103)$$

Substituindo-se a equação (101), e as análogas para as outras faces, na equação (103), obtém-se a equação para correção da pressão :

$$a_p^P P_p = a_E^P P_E + a_W^P P_W + a_N^P P_N + a_S^P P_S + a_{NE}^P P_{NE} + a_{NW}^P P_{NW} + a_{SE}^P P_{SE} + a_{SW}^P P_{SW} + b_p^P \quad (104)$$

sendo os coeficientes a_p^P , a_E^P , a_W^P , a_N^P , a_S^P , a_{NE}^P , a_{NW}^P , a_{SE}^P , a_{SW}^P e b_p^P definidos no apêndice A.

O sistema de equações lineares, obtido através da equação (104), é resolvido utilizando-se o método MSI modificado, proposto por Schneider e Zedan [23].

3.5 - CÁLCULO DO FLUXO DE MASSA NAS FACES DO VOLUME DE CONTROLE

Para o cálculo do fluxo de massa nas faces do volume de controle, é necessário realizar uma interpolação, visto que as variáveis encontram-se armazenadas no centro do volume de controle e não nas faces dos mesmos.

O fluxo de massa será calculado na face leste do volume de controle ilustrado na FIGURA 9, podendo ser estendido para as faces norte, sul e oeste, de maneira análoga.

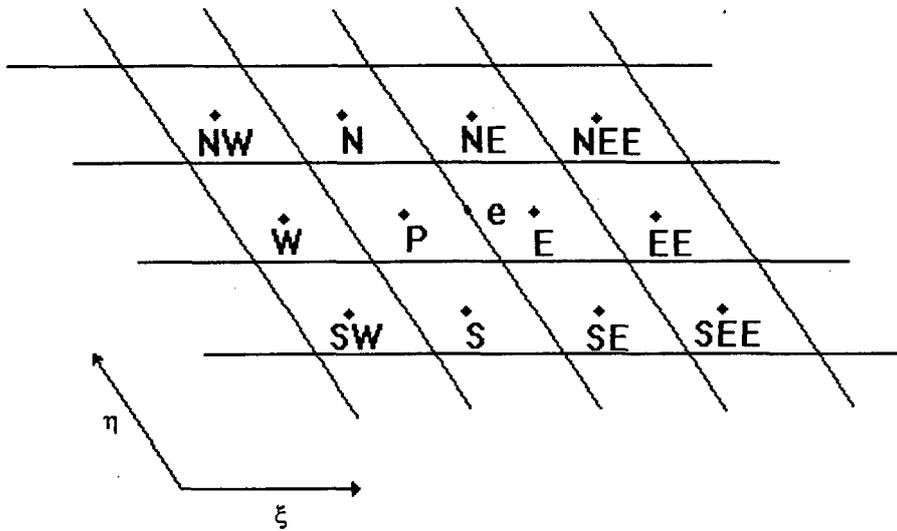


Figura 9 - Volume de controle para obtenção do fluxo de massa na face leste.

O esquema para avaliação do fluxo de massa nas faces do volume de controle proposto por Marchi et al. [11], que converge para uma única solução no regime permanente, independente do passo de tempo utilizado, é adotado neste trabalho e pode ser dado por

$$u_e = \frac{1}{2} \left[\frac{\tilde{a}_{PP}\hat{u}_P + \tilde{a}_{PE}\hat{u}_E}{(a_{PP} + a_{PE})} \right] - \Delta y_e \frac{(P_E - P_P)}{2} \quad (105)$$

ou ainda,

$$a_{Pe}u_e = \frac{\tilde{a}_{PP}\hat{u}_P + \tilde{a}_{PE}\hat{u}_E}{2} - \Delta y_e (P_E - P_P) \quad (106)$$

onde

$$a_{Pe} = \frac{a_{PP} + a_{PE}}{2} \quad (107)$$

$$\hat{a}_{PP}\hat{u}_P = \left[\sum_{nb} a_{nb} u_{NB} + (1-\alpha)a_P u_P^\circ \right]_P \quad (108)$$

$$\hat{a}_{PE}\hat{u}_E = \left[\sum_{nb} a_{nb} u_{NB} + (1-\alpha)a_P u_P^\circ \right]_E \quad (109)$$

sendo que o termo a_{PP} é o coeficiente central a_P do volume de controle P e o termo a_{PE} é o coeficiente central a_P do volume de controle E.

Em coordenadas generalizadas, utilizando-se o esquema proposto por Marchi et al. [11], pode escrever-se que

$$u_e = \frac{1}{2a_{Pe}} \left[\sum_{nb} a_{nb} u_{NB} \Big|_P + \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} \Big|_E + b^u \Big|_P + b^u \Big|_E \right] - \frac{1}{a_{Pe}} \hat{P}^u \Big|_e \quad (110)$$

e,

$$v_e = \frac{1}{2a_{Pe}} \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{NB} \Big|_P + \sum_{nb} a_{nb} v_{NB} \Big|_E + b^v \Big|_P + b^v \Big|_E \right] - \frac{1}{a_{Pe}} \hat{P}^v \Big|_e \quad (111)$$

A obtenção das componentes do vetor velocidade na face leste do volume de controle, através das equações (110) e (111), envolve os oito pontos vizinhos ao ponto P e os oito pontos vizinhos ao ponto E, bem como, os pontos P e E, conforme ilustra a FIGURA 9.

A partir das equações (110) e (111), pode se obter uma expressão para avaliação da componente contravariante da velocidade, U_e , utilizando-se a equação

$$U_e = u_e y_\eta \Big|_e - v_e x_\eta \Big|_e \quad (112)$$

De forma análoga, podem ser obtidas as componentes contravariantes da velocidade nas outras faces do volume de controle.

3.6 - CONDIÇÕES DE CONTORNO

A especificação das condições de contorno é uma tarefa importante, pois é através das condições de contorno, que se avança a solução em um processo iterativo.

O processo de aplicação das condições de contorno é extremamente dependente da localização das variáveis na malha computacional, sendo neste item, as condições de contorno, para as componentes cartesianas da velocidade e para a pressão, aplicadas ao arranjo de variáveis co-localizadas.

Os volumes fictícios para as condições de contorno das velocidades podem ser vistos na FIGURA 10.

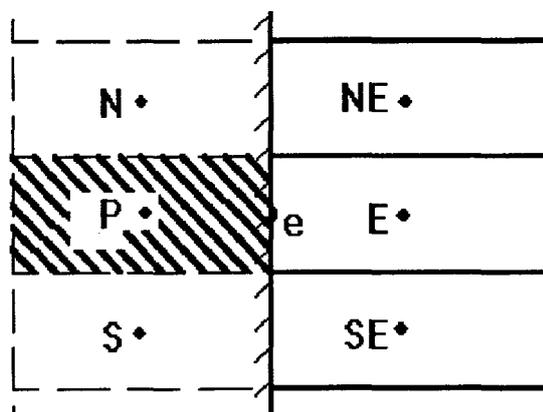


FIGURA 10 - Volume fictício para aplicação das condições de contorno para as velocidades na face oeste.

Se a componente da velocidade, na fronteira do domínio, for prescrita, pode-se escrever que

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (113)$$

e na forma discretizada para a fronteira oeste

$$\phi_P = 2\phi_e - \phi_E \quad (114)$$

Se o gradiente de velocidade na fronteira for nulo, pode-se escrever que

$$\frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} = 0 \quad (115)$$

onde \bar{n} representa a normal à face do volume de controle.

Utilizando-se o esquema de diferenças centrais, obtém-se

$$\phi_P = \phi_E \quad (116)$$

A extrapolação linear é uma forma simples de aproximar-se um termo, pois consiste em obter-se termos sobre uma reta cuja equação é conhecida através dos pontos vizinhos. A precisão da extrapolação é tanto melhor quanto mais refinada for a malha.

Utilizando-se uma extrapolação linear, para o cálculo da pressão na face do volume de controle da fronteira leste em função do valor da pressão nos pontos P e W, conforme ilustra a FIGURA 11, obtém-se

$$P_e = \frac{3}{2}P_P - \frac{1}{2}P_W \quad (117)$$

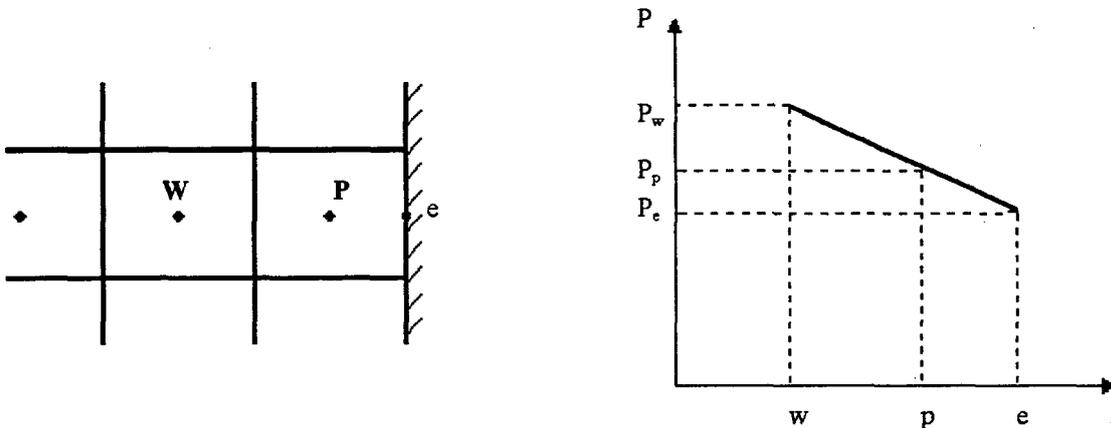


FIGURA 11 - Extrapolação Linear da pressão para a fronteira leste do volume de controle.

3.7 - DETALHES NUMÉRICOS

As métricas, jacobiano e as componentes do tensor métrico, localizados nas faces e centro do volume de controle, estão presentes na equação de conservação escrita para uma variável genérica ϕ .

O armazenamento do jacobiano e das componentes do tensor métrico (α, β, γ) é feito nas faces leste, norte e centro do volume de controle, e das métricas $(x_\xi, y_\xi, x_\eta, y_\eta)$ nas faces leste e norte do volume de controle. Este esquema de armazenamento

permite economia de memória, não ocorrendo superposição de informações geométricas.

As componentes contravariantes da velocidade são armazenadas nas faces leste e norte do volume de controle, onde são necessárias para o cálculo do fluxo de massa nas faces do volume de controle.

Para os problemas de teste escolhidos, foi aplicada a tolerância para as componentes cartesianas da velocidade, sendo o critério de convergência adotado, expresso por

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\phi^{max} - \phi^{min}} \leq 10^{-5} \quad (118)$$

RESULTADOS

O presente capítulo apresenta alguns resultados obtidos com o uso da metodologia apresentada no Capítulo 3. Com o objetivo de testar esta metodologia, foram resolvidos alguns problemas, cujas soluções estão bem estabelecidas na literatura. O primeiro problema escolhido para avaliar a metodologia apresentada é o da difusão em uma cavidade quadrada. Com o objetivo de utilizar coordenadas generalizadas, é resolvido o problema de sublimação de uma esfera de naftaleno.

Um outro problema clássico da literatura é o problema isotérmico da convecção forçada em uma cavidade quadrada, com a parede superior se movimentando com velocidade constante. É apresentada, ainda, a solução do problema de escoamento de um fluido sobre uma placa plana com transferência de massa.

4.1- DIFUSÃO EM UMA CAVIDADE QUADRADA

Com objetivo de avaliar a metodologia apresentada, é realizado o estudo da transferência de massa devido à evaporação de água.

O fenômeno de transporte de massa neste problema se dá por difusão, sendo que a solução numérica é comparada com a solução apresentada a seguir.

Através da solução da equação da conservação da espécie química, obtém-se a variação da concentração molar do fluido com a posição ao longo da cavidade.

Para o componente A, pode-se escrever a equação de conservação da espécie

química, como,

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial(C_A u)}{\partial x} + \frac{\partial(C_A v)}{\partial y} + \frac{\partial(C_A w)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} \right) + R_A''' \quad (119)$$

onde as variáveis u e v são as componentes cartesianas do vetor velocidade, nas direções x e y , respectivamente. A variável D_{AB} é a difusividade do componente A no componente B e R_A''' é a taxa molar de reação química por unidade de volume. A variável C_A é a concentração molar do componente A.

Para o problema de difusão em uma cavidade quadrada são admitidas as seguintes hipóteses : escoamento laminar unidirecional e isotérmico de um fluido newtoniano, em regime permanente, com taxa de reação química nula. É admitido que o transporte de massa se dá somente por difusão.

A condição de pressão constante (1 atm) e problema isotérmico faz com que a difusividade D_{AB} , dada por Welty et al. [33] e igual a $0.260 \text{ cm}^2/\text{s}$ para temperatura de 298 K seja corrigida para temperatura de interesse, 333 K, pela equação de Chapman-Enskog [2], fornecendo o valor de $0.307 \text{ cm}^2/\text{s}$.

A água se difunde na cavidade quadrada com ar, à pressão atmosférica. Seu peso molecular é 18 g/gmol e sua massa específica é $1,14 \text{ g/cm}^3$. A pressão de vapor da água é função da temperatura e pode ser obtida pela equação de Antoine, dada por Himmelblau [6] e expressa por

$$\ln(p^v) = 18,3036 - \frac{3816,44}{-46,13 + T} \quad (120)$$

onde T é a temperatura na qual se encontra a água na base da cavidade e é igual à 333 K, resultando, para esta temperatura, a pressão de vapor da água igual a 148.394 mmHg .

A fração molar da água na interface gás-líquido, \dot{y}_A , é obtida pela lei de Raoult-Dalton, (Smith e Van Ness [26]), dada por

$$\dot{y}_A = \frac{P_A^v}{P} \quad (121)$$

onde as variáveis P_A^v e P são a pressão de vapor do componente A e a pressão total do sistema, respectivamente.

Para os dados do problema da difusão em uma cavidade quadrada, obtém-se a fração molar do componente A, na interface gás-líquido, dada por $\dot{y}_A = 0.1952$. Esta fração molar pode ser relacionada com a fração mássica (\dot{W}_A^*), pela equação

$$\dot{W}_A^* = \frac{\dot{y}_A M_A}{M} \quad (122)$$

onde M_A é o peso molecular do componente A e M é o peso molecular da mistura.

Para a fração molar, \dot{y}_A , o valor de \dot{W}_A^* resultante é igual à 0.131.

A equação da conservação da espécie química A, para as hipóteses admitidas, resulta em

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{N}_A = 0 \quad (123)$$

Para escoamento unidirecional na direção z, a equação (123) pode ser escrita como

$$\frac{dN_{A,z}}{dz} = 0 \quad (124)$$

sendo o fluxo molar da espécie química A na direção z, $N_{A,z}$, dado por

$$N_{A,z} = -CD_{AB} \frac{dy_A}{dz} + y_A(N_{A,z} + N_{B,z}) \quad (125)$$

O fluxo molar das espécie química B na direção z é admitido ser zero, devido à condição de ar estagnado. O fluxo molar da espécie química A pode ser dado como

$$N_{A,z} = -\frac{CD_{AB}}{(1-y_A)} \frac{dy_A}{dz} \quad (126)$$

onde C é a concentração total do sistema.

Substituindo o fluxo molar da espécie química A na direção z, na equação (123), considerando-se o fluxo molar da espécie química B igual a zero, obtém-se

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{-CD_{AB}}{(1-y_A)} \frac{dy_A}{dz} \right] = 0 \quad (127)$$

Mantendo-se a temperatura e a pressão constantes, consequentemente, a difusividade, D_{AB} , e a concentração, C, são constantes. Integrando-se a equação (127), resulta a seguinte equação :

$$\frac{1}{(1-y_A)} \frac{dy_A}{dz} = C_1 \quad (128)$$

onde C_1 é uma constante a ser determinada. Integrando-se a equação (128), obtém-se a solução geral que, aplicadas as condições de contorno, resulta na solução específica do problema de difusão em uma cavidade quadrada.

A equação (128) integrada é dada por

$$-\ln(1-y_A) = C_1 z + C_2 \quad (129)$$

onde C_2 é uma constante a ser determinada.

Para a solução da equação (129) são necessárias duas condições de contorno. As condições de contorno do problema são dadas na base e no topo da cavidade, ou seja, para $z=0$, a fração molar, y_A é $y_{A,0}$, e para $z=L$, a fração molar é igual a zero. Aplicando-se as condições de contorno na equação (129) são determinados os valores

das constantes C_1 e C_2 , fornecendo a equação analítica para difusão do fluido na cavidade quadrada, dada por

$$y_A = 1 - e^{0.43432z - 0.21716} \quad (130)$$

Através da equação (130), serão determinadas as frações molares e mássicas para determinadas posições e comparadas com a solução numérica.

A solução numérica é obtida utilizando-se a metodologia proposta para malha 30x30 e 40x40.

Na FIGURA 12 é apresentado um diagrama esquemático do domínio do problema, com a especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas.

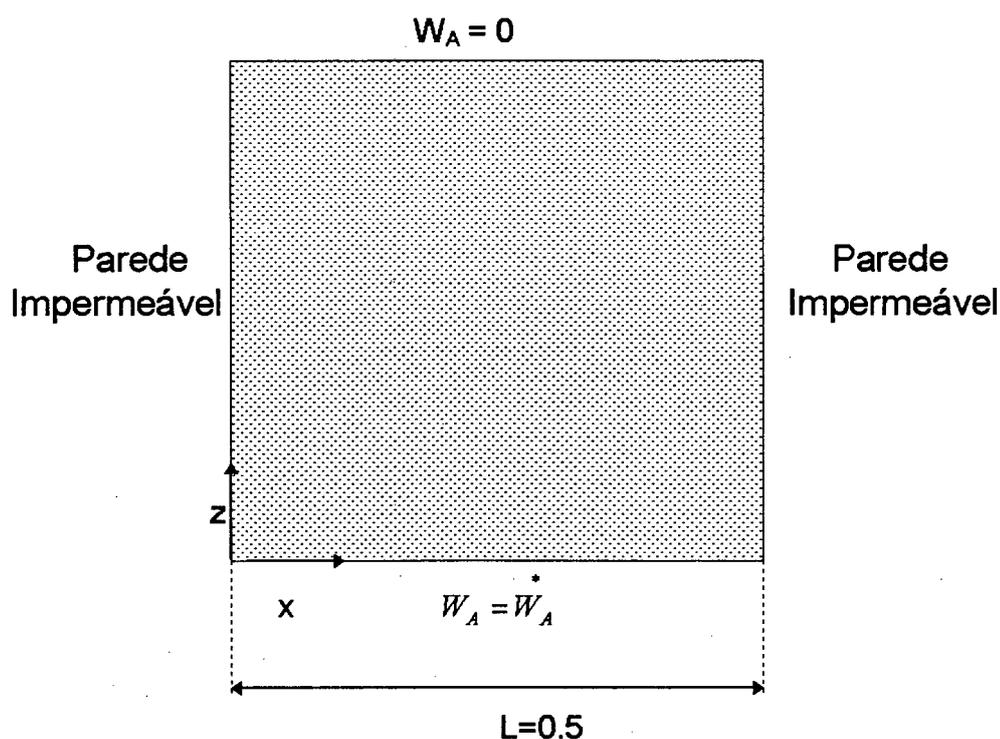


FIGURA 12 - Especificação das condições de contorno para problema de difusão em uma cavidade quadrada.

As condições de contorno prescritas são fração mássica igual a zero na parede superior e fração mássica igual à \dot{W}_A constante na interface gás-líquido. As paredes laterais são consideradas impermeáveis.

Os resultados da fração mássica obtidos a partir das soluções analítica e numérica, com malha 30x30 e 40x40, são apresentados na FIGURA 13.

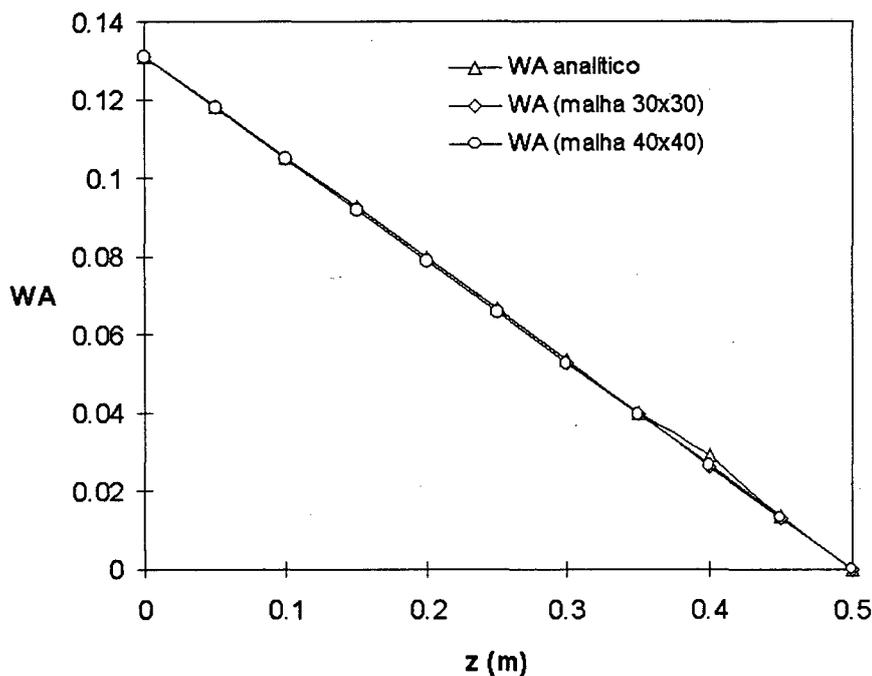


FIGURA 13 - Perfil da fração mássica W_A obtido através da solução analítica e numérica, com malha 30x30 e 40x40, ao longo do eixo z, para $x=L/2$.

No QUADRO 2 são apresentados os valores da fração mássica obtidos com malha 30x30 e 40x40, bem como, o erro obtido, comparativamente à solução analítica.

Pode-se observar que o erro máximo relativo da fração mássica obtida utilizando-se malha 30x30 e malha 40x40 é inferior à 2,0 %.

QUADRO 2 - Fração mássica obtida através da solução analítica e numérica, com malhas 30x30 e 40x40, e erro relativo à solução analítica.

| z (m) | W _A analítico | W _A numérico (malha 30x30) | Erro relativo % (30x30) | W _A numérico (malha 40x40) | Erro relativo % (40x40) |
|-------|--------------------------|---------------------------------------|-------------------------|---------------------------------------|-------------------------|
| 0.00 | 0.131 | 0.131 | 0 | 0.131 | 0 |
| 0.05 | 0.1182 | 0.1179 | 0.2 | 0.1180 | 0.1 |
| 0.10 | 0.1054 | 0.1049 | 0.3 | 0.1050 | 0.3 |
| 0.15 | 0.0926 | 0.0919 | 0.5 | 0.0919 | 0.5 |
| 0.20 | 0.0796 | 0.0788 | 0.6 | 0.0789 | 0.5 |
| 0.25 | 0.0665 | 0.0658 | 0.5 | 0.0658 | 0.5 |
| 0.30 | 0.0534 | 0.0526 | 0.6 | 0.0527 | 0.5 |
| 0.35 | 0.0401 | 0.0395 | 0.4 | 0.0395 | 0.4 |
| 0.40 | 0.0289 | 0.0263 | 1.9 | 0.02636 | 1.9 |
| 0.45 | 0.0134 | 0.0132 | 0.1 | 0.0132 | 0.1 |
| 0.50 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

A FIGURA 14 apresenta o erro obtido quando se utiliza as malhas 30x30 e 40x40, comparativamente à solução analítica.

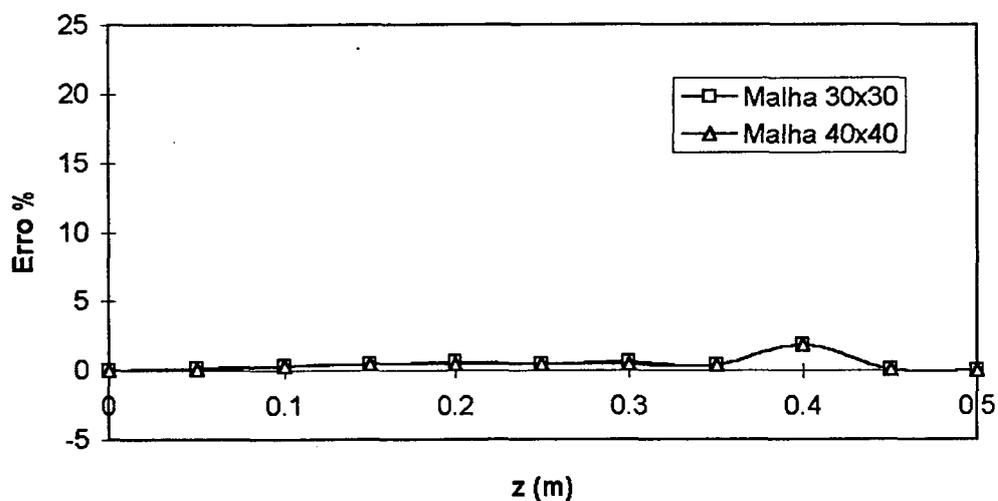


FIGURA 14 - Erro da fração mássica obtido com malha 30x30 e 40x40, em relação à solução analítica em $x = L/2$.

Conforme se pode verificar, o algoritmo numérico fornece resultados bastante precisos para problemas de difusão mássica.

4.2 - SUBLIMAÇÃO DE UMA ESFERA DE NAFTALENO

O processo de transferência de massa difusiva através da sublimação de uma esfera de naftaleno no ar é estudado neste problema. De forma análoga ao problema da difusão em uma cavidade quadrada, resolve-se a equação da conservação da espécie química A, em coordenadas esféricas.

Para o componente A, pode-se escrever a equação de conservação da espécie química em coordenadas esféricas, como,

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_{A,r}) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (N_{A,\theta} \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial N_{A,\phi}}{\partial \phi} \right] = R_A''' \quad (131)$$

onde $N_{A,r}$, $N_{A,\theta}$ e $N_{A,\phi}$ são as componentes do fluxo molar do componente A em coordenadas esféricas. A variável C_A é a concentração molar do componente A, e R_A''' é a taxa molar de reação química, por unidade de volume.

Para a obtenção da solução analítica do problema de sublimação de uma esfera de naftaleno são admitidas as seguintes hipóteses : escoamento laminar unidirecional e isotérmico de um fluido newtoniano, em regime permanente, com taxa de reação química nula e fluxo molar do componente A somente na direção radial. É admitido que o transporte de massa se dá somente por difusão.

A difusividade, D_{AB} , é determinada pela equação de Chapman-Enskog [2] e é igual à $0.761 \text{ cm}^2/\text{s}$, para temperatura de 345 K e pressão de 1 atm. A fração molar na interface naftaleno-ar é determinada pela equação de Raoult-Dalton [33], para temperatura de 345 K, fornecendo $\dot{y}_A = 0.004125$.

A equação da conservação da espécie química A para escoamento unidirecional na direção r , para as hipóteses admitidas, resulta em

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_{A,r}) = 0 \quad (132)$$

onde o fluxo molar da espécie química A na direção r é dado por $N_{A,r} = \frac{CD_{AB}}{1-y_A} \frac{dy_A}{dr}$.

Substituindo-se o fluxo molar na direção r , $N_{A,r}$, na equação (132), mantendo-se a temperatura e a pressão constantes, a equação (132) resulta na solução geral para problema da sublimação do naftaleno, dada por

$$-\ln(1-y_A) = \frac{-C_1}{r} + C_2 \quad (133)$$

A determinação das constantes C_1 e C_2 é feita pela aplicação das condições de contorno. As condições de contorno para a sublimação do naftaleno são dadas como: na superfície do naftaleno, em $r = R$, sendo R o raio da esfera, a fração molar é igual a \dot{y}_A e para um ponto suficientemente afastado da esfera de naftaleno, a fração molar é igual a zero. Aplicando-se as condições de contorno na equação (133), são determinados os valores das constantes C_1 e C_2 . A equação analítica para sublimação do naftaleno obtida é dada por :

$$y_A = 1 - (1 - \dot{y}_A)^{\frac{R}{r}} \quad (134)$$

A partir da equação (134), serão determinadas as frações molares e mássicas para determinadas posições e comparadas com a solução numérica.

A solução numérica é obtida utilizando-se a metodologia proposta, para malha 40x40 igualmente espaçada na direção r , conforme ilustra a FIGURA 15.

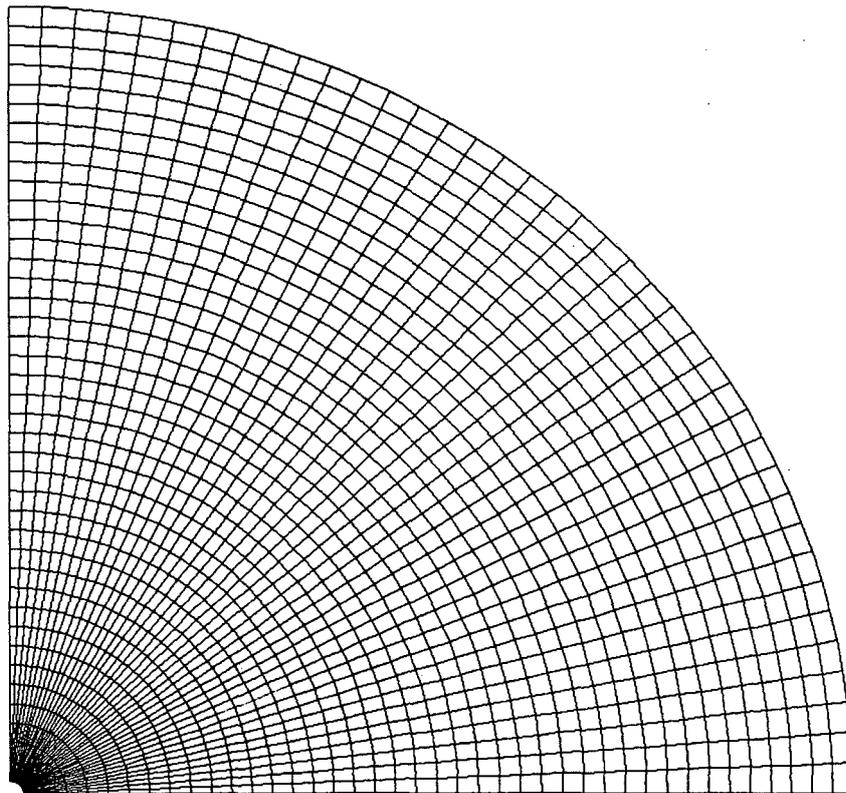


FIGURA 15 - Malha 40x40 utilizada na solução da sublimação de uma esfera de naftaleno.

O problema da sublimação de uma esfera de naftaleno é considerado axissimétrico e, devido à simetria, é resolvido somente um quarto de uma esfera.

Na FIGURA 16 é apresentado um diagrama esquemático do domínio do problema, com a especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas.

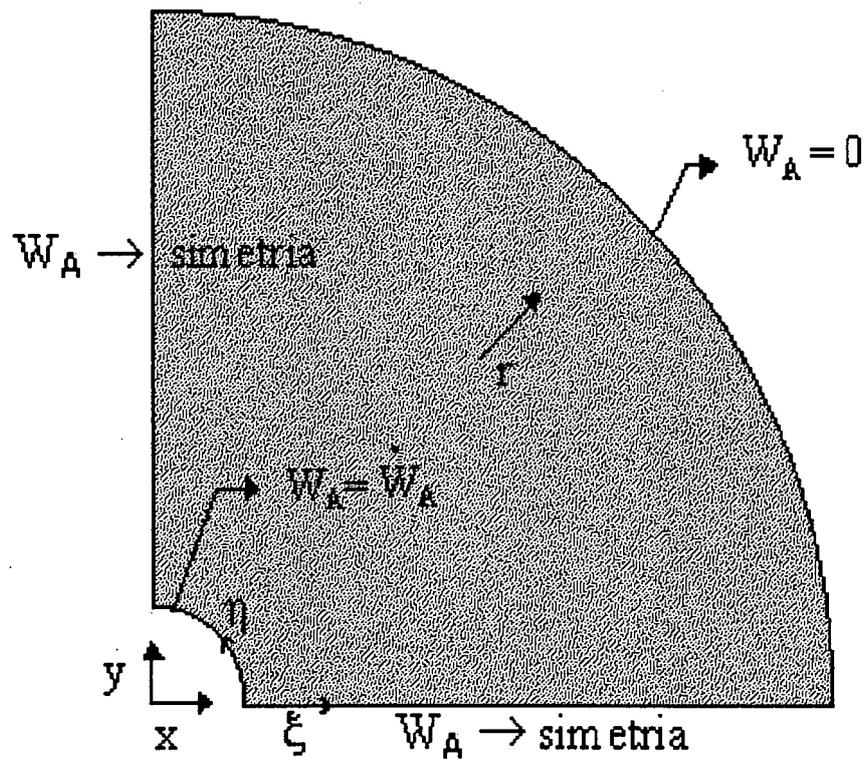


FIGURA 16 - Especificação das condições de contorno para o problema da sublimação de naftaleno no ar.

As condições de contorno são : fração mássica prescrita na superfície da esfera de naftaleno e, em uma distância suficientemente grande da superfície da esfera de naftaleno, fração mássica nula.

A fração mássica obtida através das soluções analítica e numérica é apresentada na FIGURA 17.

O erro da fração mássica obtido utilizando-se a malha 40x40, relativamente à solução analítica, é apresentado na FIGURA 18.

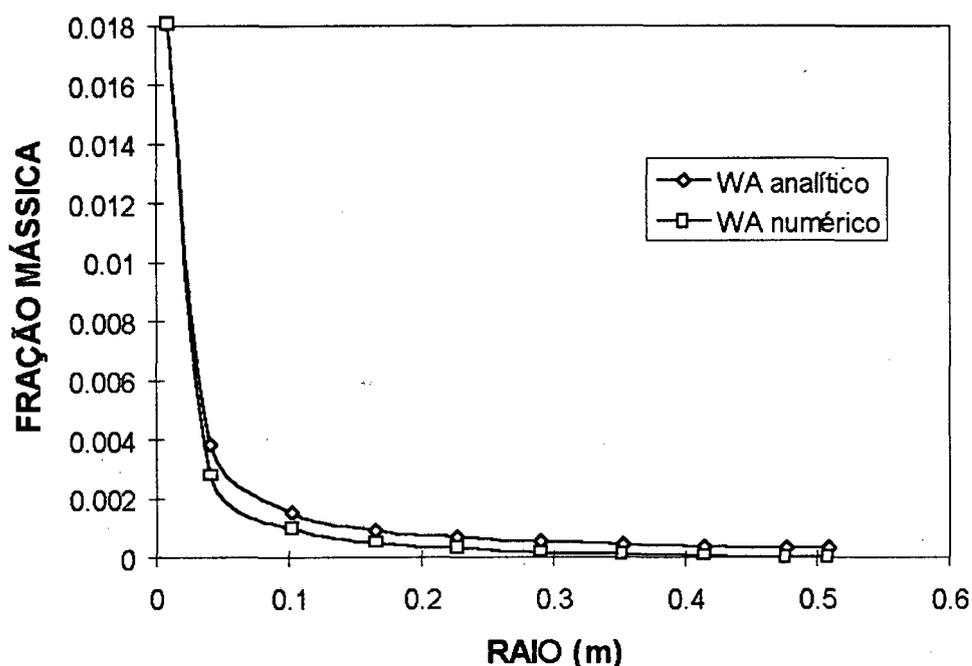


FIGURA 17 - Perfil de fração mássica (W_A), analítico e numérico, ao longo do eixo r com uma inclinação de 45° com a horizontal.

O erro relativo máximo obtido no cálculo da fração mássica, comparativamente à solução analítica é 6.0 %.

Os resultados de fração mássica são apresentados no QUADRO 3 juntamente com o erro relativo à solução analítica.

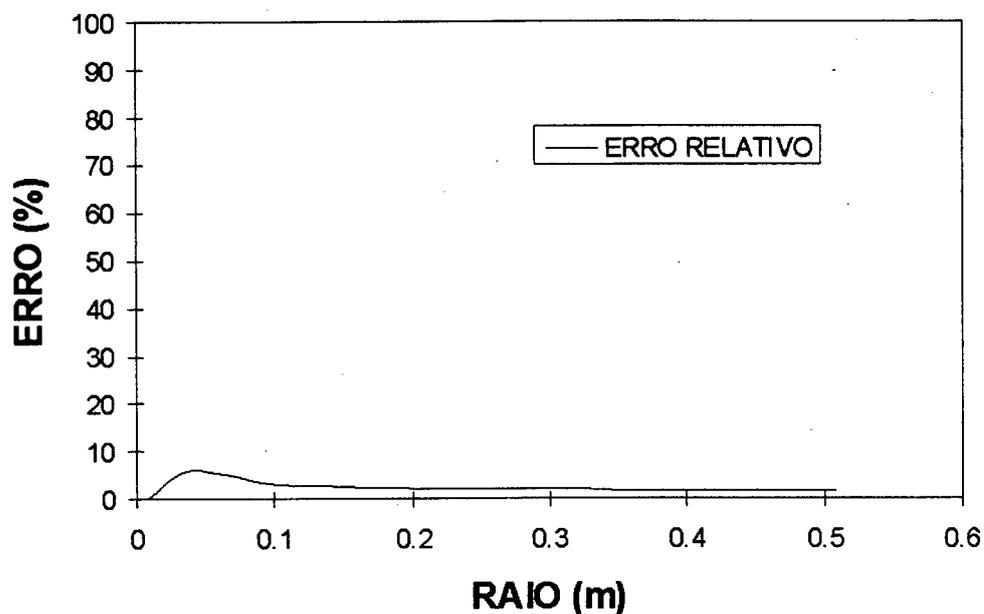


FIGURA 18 - Erro obtido no cálculo da fração mássica com malha 40x40, em relação à solução analítica.

QUADRO 3 - Fração mássica obtida através da solução analítica e numérica, com malha 40x40, e erro relativo à solução analítica.

| Raio (m) | W_A analítico | W_A numérico | Erro relativo % |
|----------|-----------------|----------------|-----------------|
| 0.0084 | 0.018 | 0.018 | 0 |
| 0.03965 | 0.003862 | 0.002768 | 6.0 |
| 0.10215 | 0.001502 | 0.000949 | 3.0 |
| 0.16465 | 0.000932 | 0.000505 | 2.3 |
| 0.22715 | 0.000676 | 0.000303 | 2.0 |
| 0.28965 | 0.00053 | 0.000187 | 1.9 |
| 0.35215 | 0.000436 | 0.000111 | 1.8 |
| 0.41465 | 0.00037 | 5.70E-05 | 1.7 |
| 0.47715 | 0.000322 | 1.70E-05 | 1.6 |
| 0.5084 | 0.000302 | 0 | 1.6 |

As isocurvas da fração mássica obtidas numericamente foram apresentadas na FIGURA 19 para os seguintes valores de ϕ : 0.01; 0.005; 0.001; 0.00025; 0.0005; 0.0001; 0.00005, sendo ϕ dado por $\phi = \frac{W_A}{W_A^*}$.

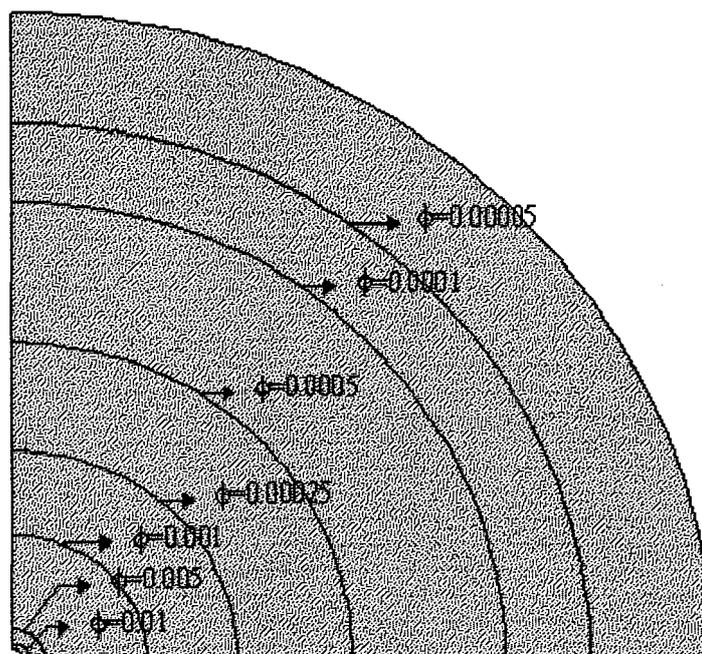


FIGURA 19 - Curvas de fração mássica constante para o problema de sublimação de uma esfera de naftaleno.

As linhas de fração mássica constante tem valores de ϕ mais elevados, próximo à superfície do naftaleno, onde a fração mássica é mais próxima da fração mássica da superfície do naftaleno.

Analisando-se a FIGURA 19, pode-se verificar que a hipótese de simetria admitida é consistente com a solução analítica do problema.

4.3 - CAVIDADE QUADRADA COM CONVECÇÃO MÁSSICA

O estudo da transferência de massa devido à evaporação de um líquido volátil é realizado em uma cavidade quadrada, onde a parte superior se movimenta com velocidade constante. Os gases dentro da cavidade formam uma mistura binária ideal, sendo que um dos componentes da mistura é o vapor do líquido evaporado, e o outro é um gás insolúvel no líquido.

Os resultados obtidos serão apresentados como função das condições de contorno do topo da cavidade, da interface gás-líquido, e da distância entre o topo da cavidade e a interface gás-líquido.

Os perfis de velocidade obtidos são comparados com os de Ghia et al. [5], utilizando uma metodologia numérica com malha 129x129, com Reynolds 400 e 1000.

Na FIGURA 20, é apresentado o diagrama esquemático do domínio do problema, com a especificação das condições de contorno.

As condições de contorno prescritas são de velocidades nulas e impermeabilidade, nas paredes laterais; velocidades nulas e fração mássica igual \dot{W}_A (condição de equilíbrio) constante na interface gás-líquido e a parede superior se movimentando com velocidade U constante, sendo a fração mássica nula, conforme ilustrado na FIGURA 20.

Também é mostrada, na FIGURA 20, a geometria do problema, onde L é o comprimento da cavidade e H é a distância entre o topo da cavidade e a interface gás-líquido.

O problema foi resolvido empregando-se a metodologia proposta no Capítulo 3,

sendo as equações governantes do problema dadas no sistema cartesiano, considerando-se regime permanente, fluido newtoniano, escoamento laminar, incompressível e bidimensional e sem reação química. As malhas cartesianas utilizadas foram 10x10, 20x20, 30x30, 40x40 e 60x60.

O perfil de velocidade obtido para $Re=400$ é apresentado na FIGURA 21 para $x=0.5$, onde se observa que os resultados obtidos com a malha 40x40 e 60x60 apresentam boa conformidade com os dados apresentados por Ghia et al. [5], com malha 129x129.

Na FIGURA 22 pode-se observar que o perfil da componente de velocidade u obtido para $Re = 1000$, onde ocorre a predominância da convecção no processo de transferência de quantidade de movimento, em $x=0.5$, com malhas 40x40 e 60x60, se aproxima dos resultados apresentados por Ghia et al. [5].

A FIGURA 23 apresenta os perfis de concentração obtidos para $Re=400$ onde se observa que os resultados obtidos com malha 20x20 apresentam boa concordância com os obtidos com malha 40x40 e 60x60.

O perfil de concentração obtido com malhas 10x10, 20x20, 40x40 e 60x60, para $Re=1000$, é mostrado FIGURA 24.

Em ambos os casos, $Re=400$ e $Re=1000$, a solução da fração mássica obtida com malha 60x60 será tomada como referência, já que a solução obtida com malhas mais refinadas apresentam perfil coincidentes.

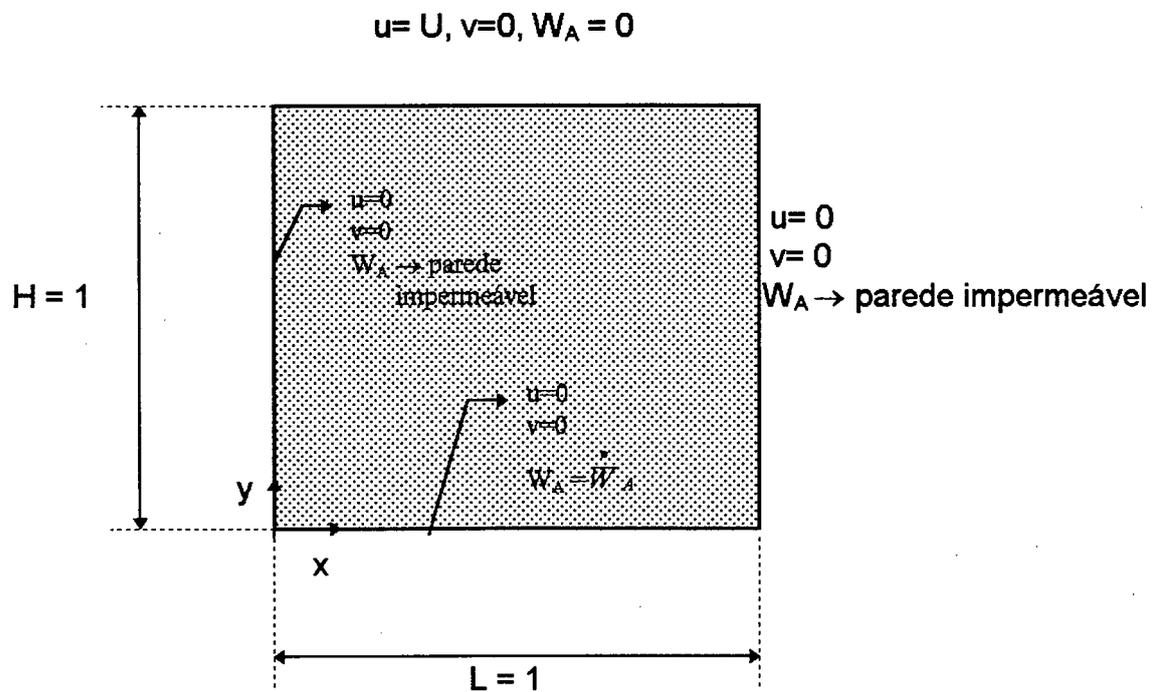


FIGURA 20 - Especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas para o problema da cavidade quadrada com convecção mássica.

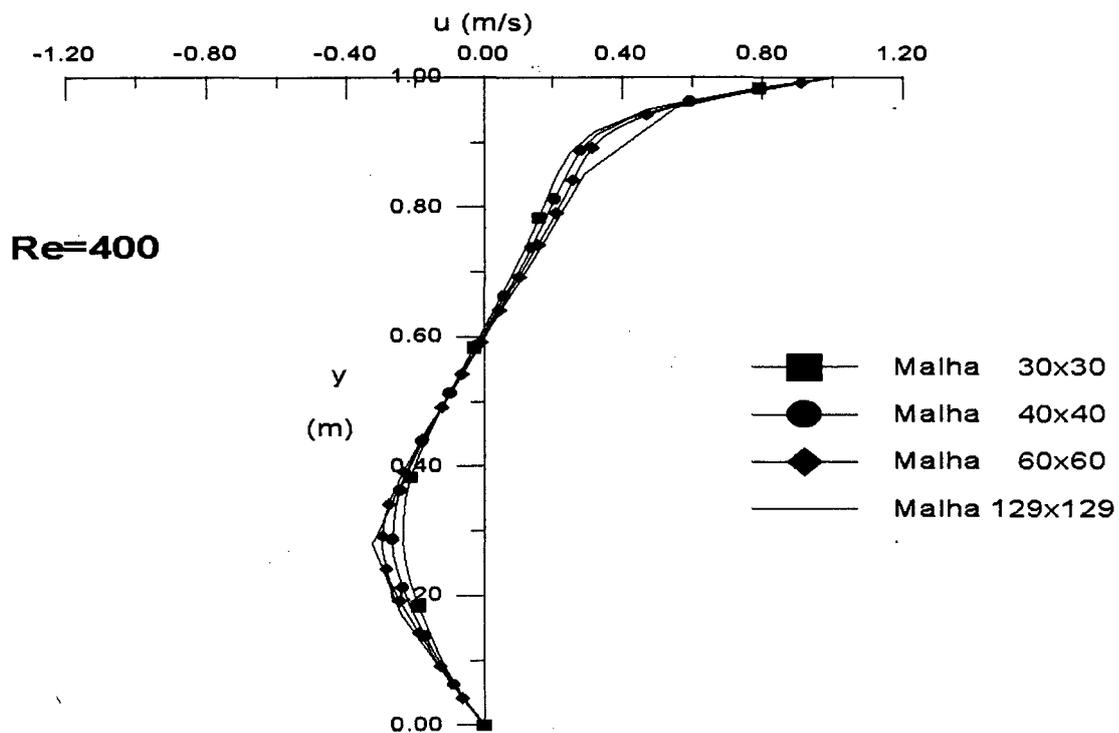


FIGURA 21 - Perfil da componente de velocidade u , para o caso de $Re=400$, obtido com malhas cartesianas 30x30, 40x40 e 60x60.

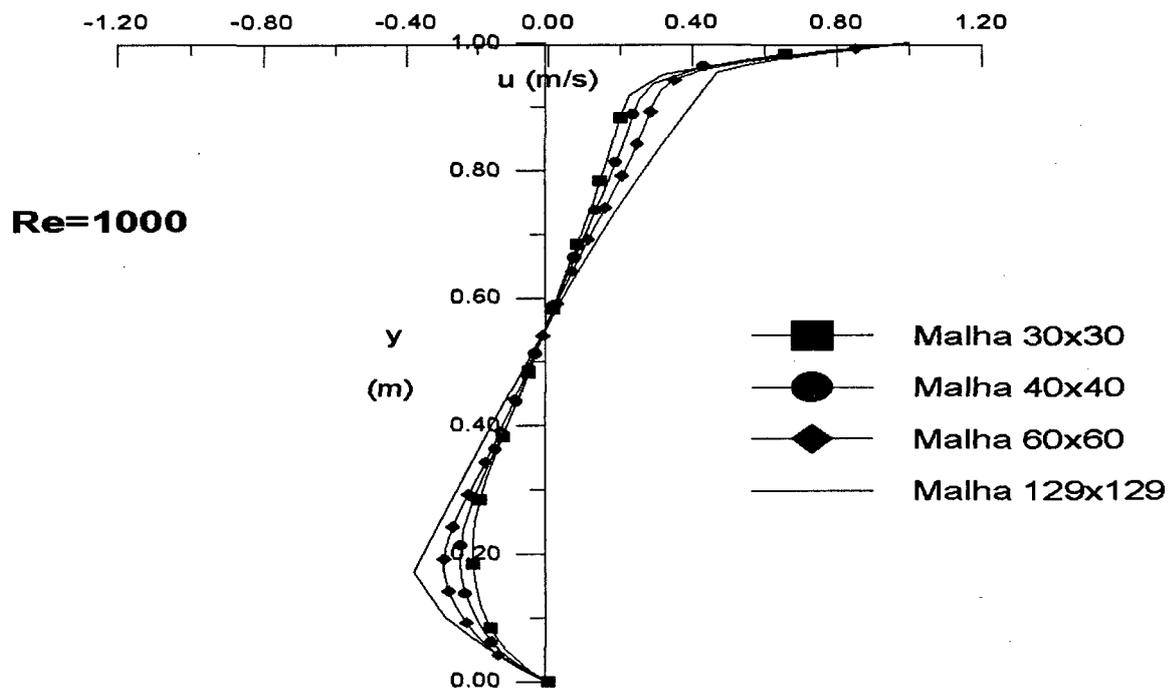


FIGURA 22 - Perfil da componente de velocidade u , para o caso de $Re=1000$, obtido com malhas cartesianas 30x30, 40x40 e 60x60.

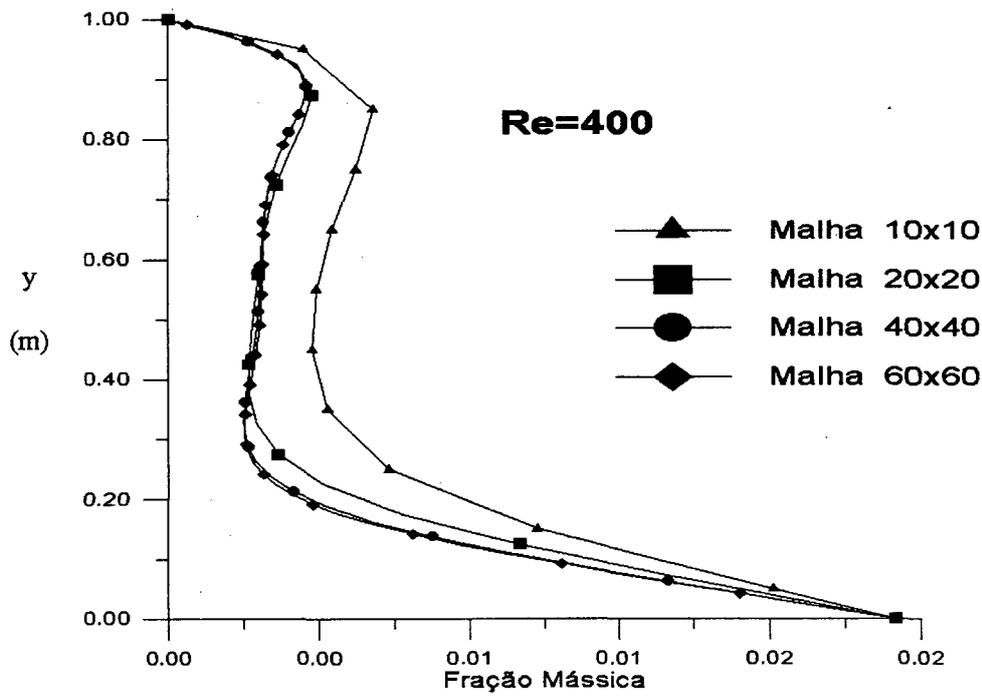


FIGURA 23 - Perfil da Fração Mássica, W_A , para o caso de $Re=400$, obtido com malhas cartesianas 10x10, 20x20, 40x40 e 60x60.

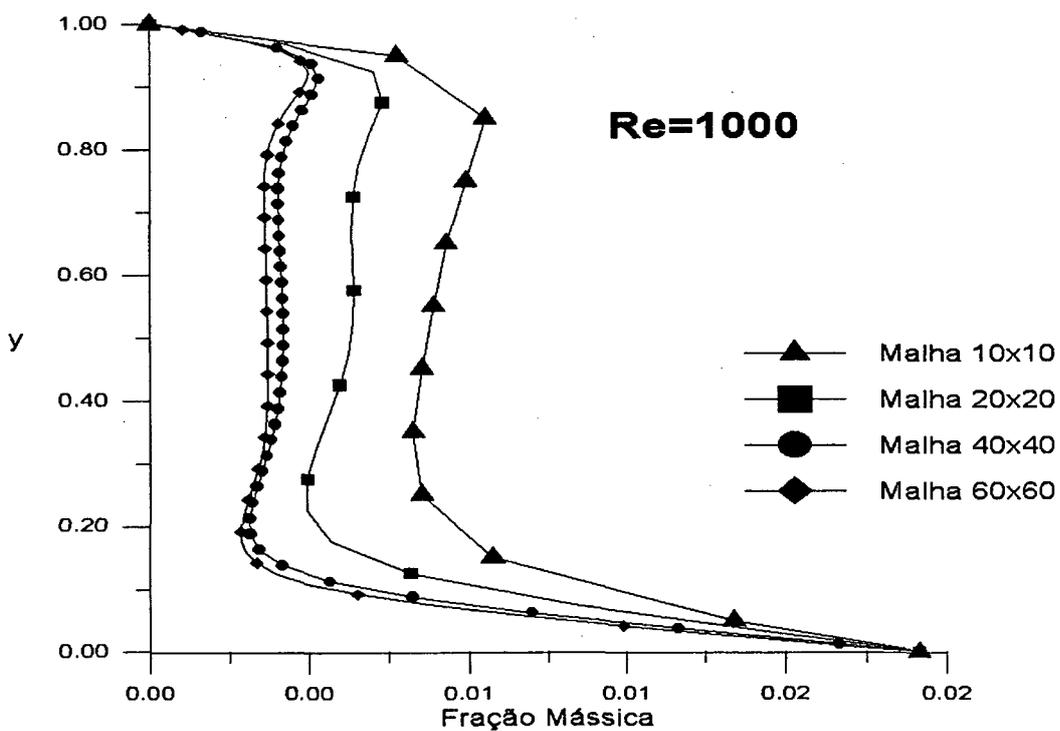


FIGURA 24 - Perfil da Fração Mássica, W_A , para o caso de $Re=1000$, obtido com malhas cartesianas 10x10, 20x20, 40x40 e 60x60.

O erro relativo médio no perfil de concentração obtido com a utilização das malhas 10x10, 20x20, 40x40, comparativamente à malha 60x60, é apresentado no QUADRO 4.

QUADRO 4 - Erro relativo médio no perfil de concentração obtido com malhas 10x10, 20x20 e 40x40.

| | Malhas | Erro (%) |
|-----------|--------|----------|
| Re = 400 | 10x10 | 34.04 |
| | 20x20 | 05.99 |
| | 40x40 | 00.16 |
| Re = 1000 | 10x10 | 77.39 |
| | 20x20 | 36.61 |
| | 40x40 | 06.47 |

As FIGURAS 25 E 26 apresentam as linhas de concentração constante obtidas com a utilização do esquema proposto, para o caso de Re=400 e 1000, respectivamente, com malha cartesiana 40x40.

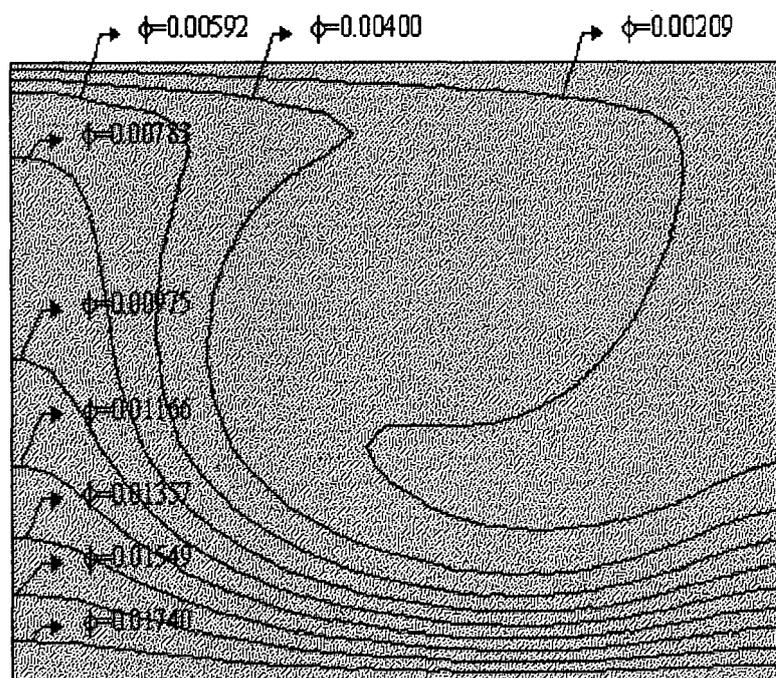


FIGURA 25 - Linhas de concentração constante, malha 40x40, Re = 400

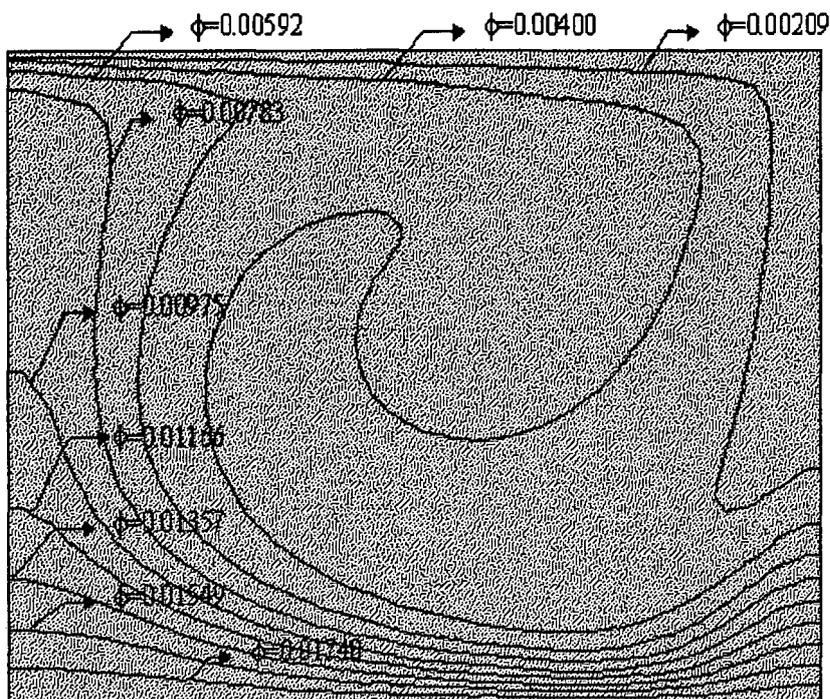


FIGURA 26 - Linhas de concentração constante, malha 40x40, $Re = 1000$

Os mapas das linhas de concentração que são apresentados nas FIGURAS 25 e 26 foram obtidos para a razão comprimento/ largura igual à 1.

Os resultados numéricos obtidos para o número de Sherwood em função do número de Reynolds são apresentados na FIGURA 27, para número de Schmidt igual a 0.6 e $L/H = 1.0$.

Foi utilizada a malha 30x30, visando a comparação com os resultados apresentados por Prata et al. [15], que obtiveram a solução deste problema, considerando-se o sistema não isotérmico, resolvendo, conjuntamente, a equação de conservação de energia.

O erro máximo obtido no cálculo do número de Sherwood comparativamente à solução obtida por Prata et al. [15] é apresentado no QUADRO 5.

QUADRO 5 - Erro máximo obtido no cálculo do número de Sherwood

| | Re | Erro (%) |
|-------------------|------|----------|
| Presente Trabalho | 100 | 10.49 |
| | 400 | 13.03 |
| | 1000 | 24.64 |

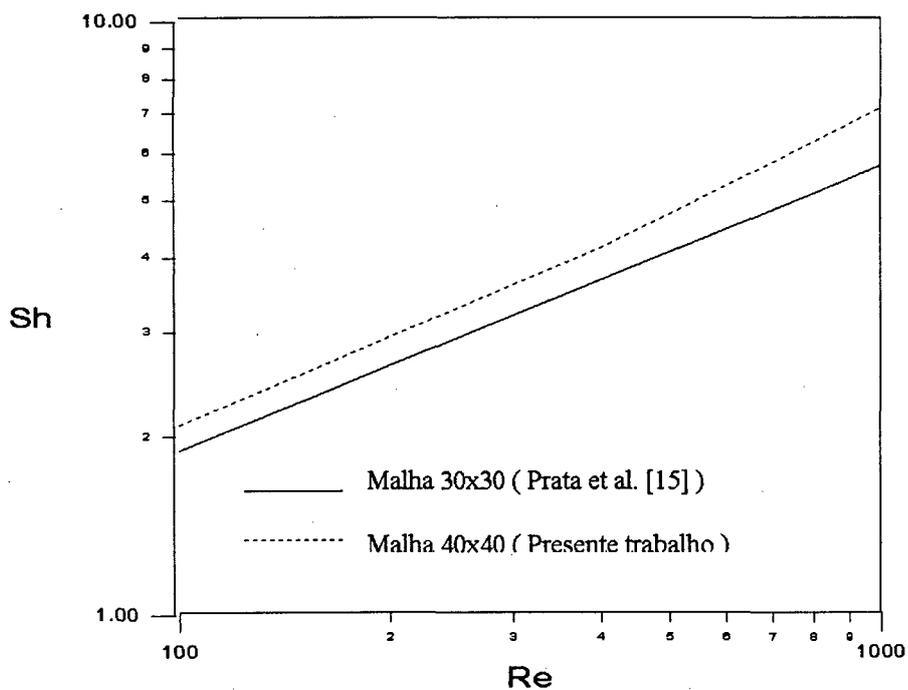


FIGURA 27 - Influência do número de Reynolds sobre o número de Sherwood, para número de Schmidt igual a 0.6.

Os resultados obtidos neste trabalho, considerando-se a hipótese de sistema isotérmico, foram comparados com os resultados apresentados por Prata et al. [15] com malha 30x30, que resolveram o problema térmico acoplado ao problema hidrodinâmico, sendo que o erro máximo obtido foi de 24.64%, para número de Reynolds igual a 1000, onde a convecção é predominante, conforme apresentado por Valle et al. [31].

4.4 - ESCOAMENTO SOBRE UMA PLACA PLANA COM TRANSFERÊNCIA DE MASSA

Neste problema é estudada a convecção forçada sobre uma placa plana com transferência de massa devido à evaporação de um líquido volátil.

São obtidos os perfis de velocidade, concentração e as espessuras das camadas limites hidrodinâmica e mássica. Estes resultados são comparados com os resultados apresentados na literatura [4,21].

É avaliada a influência do número de Reynolds para Schmidt igual à 1.2 e a influência do número de Schmidt para Reynolds igual a 50000 sobre o fenômeno de transferência de massa. O resultado é comparado com os resultados apresentados na literatura.

Na FIGURA 28 é apresentado o diagrama esquemático do domínio do problema, com a especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas.

As condições de contorno prescritas são componentes do vetor velocidade nulas e fração mássica igual a \dot{W}_A constante na interface gás-líquido. Na corrente de saída, foi imposta a condição de contorno de saída (derivada nula) e, na parte superior do domínio, a condição de contorno é de derivada nula. No contorno oeste, é prescrita a componente do vetor velocidade na direção x igual a u_∞ , na direção y igual a zero e fração mássica nula.

Também é mostrada na FIGURA 28 a geometria do problema, onde L é o comprimento da placa plana.

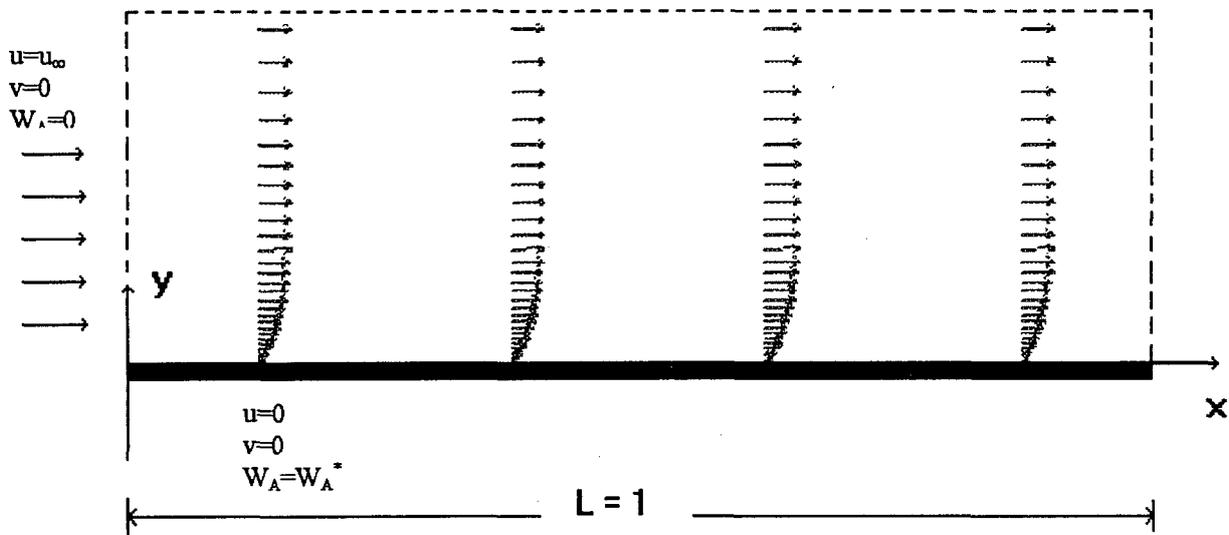


FIGURA 28 - Especificação das condições de contorno, situação física e sistema de coordenadas para o problema de escoamento sobre uma placa plana.

O problema foi resolvido empregando-se a metodologia proposta no Capítulo 3, sendo as equações governantes do problema escritas no sistema cartesiano, considerando-se regime permanente, fluido newtoniano, escoamento laminar, incompressível, bidimensional e sem reação química.

Na FIGURA 29 são apresentados os vetores velocidades do escoamento ao longo de toda a placa.

Os perfis de velocidade u e v obtidos utilizando-se a metodologia numérica, com malha 30×30 , para Reynolds igual a 50000 e Schmidt igual a 1.2 são apresentados nas FIGURAS 30 E 31, para $x=L$. Nestas figuras se observa que os resultados obtidos pela

simulação numérica apresentam boa conformidade com os obtidos pela solução de Blasius apresentada na literatura [4,21].

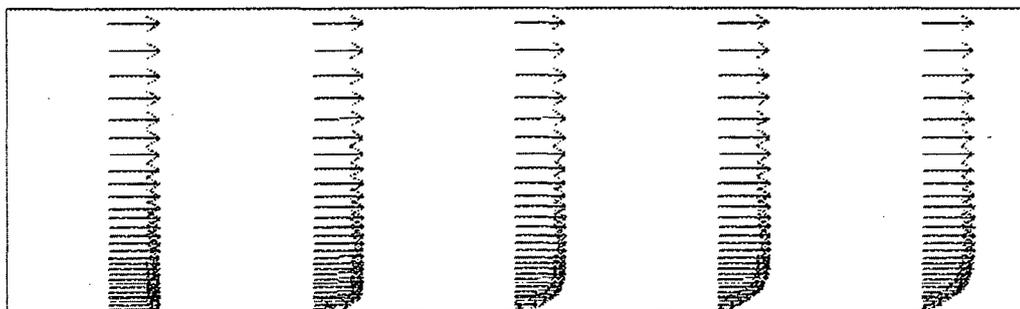


FIGURA 29 - Vetores velocidade do problema de escoamento sobre uma placa plana, a partir de $x=0$.

A região próxima à placa apresenta as maiores diferenças entre os resultados numéricos obtidos com malha 30×30 e os resultados obtidos pela solução de Blasius, com um erro relativo máximo, para a componente de velocidade u , de 26 % e com um erro relativo máximo para a velocidade v menor que 0.2 %. Isto ocorre porque a região próxima a placa é a região onde estão concentrados os maiores gradientes, tanto de velocidade quanto de concentração.

A FIGURA 32 apresenta um gráfico dos erros obtidos nos perfis das componentes de velocidade u e v , em $x=L$, calculados em relação à solução de Blasius.

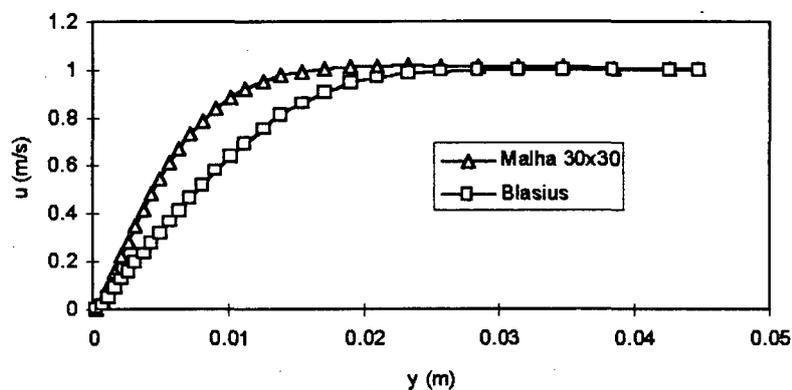


FIGURA 30 - Perfil da componente de velocidade u , obtido pela simulação numérica, com malha 30x30, em $x=L$, para $Re=50000$ e $Sc=1.2$.

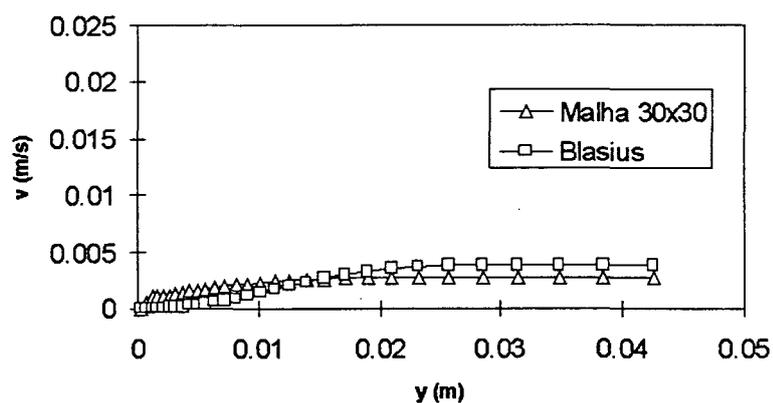


FIGURA 31 - Perfil da componente de velocidade v obtido pela simulação numérica, com malha 30x30, em $x=L$, para $Re=50000$ e $Sc=1.2$.

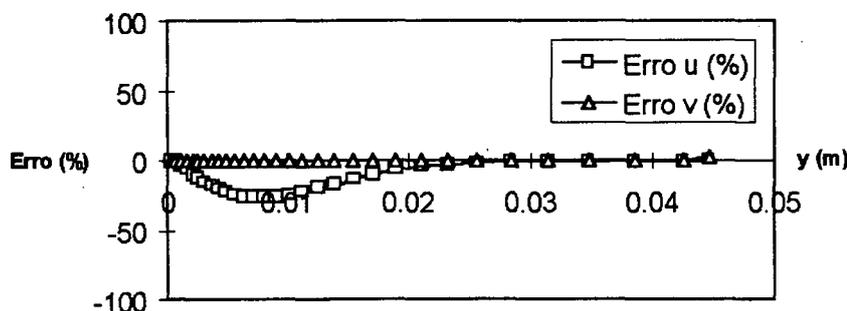


FIGURA 32 - Erro obtido nas componentes do vetor velocidade, em relação à solução de Blasius, em $x=L$.

A FIGURA 33 apresenta o perfil de concentração obtido com malha 30x30, para Reynolds igual a 50.000 e Schmidt igual a 1.2, em $x=L$.

O perfil de concentração obtido numericamente, com malha 30x30, é comparado com a solução apresentada na literatura [4,21], e apresenta o mesmo comportamento dos perfis de velocidades, ou seja, na região próxima à placa, onde os gradientes são acentuados, encontra-se o erro relativo máximo para fração mássica de 22 %.

A FIGURA 34 apresenta um gráfico dos erros obtidos no cálculo da fração mássica comparativamente à solução apresentada por Burmeister [4], em $x=L$.

Na FIGURA 35 é apresentada a espessura da camada limite mássica (δ_m) do problema, para $Re = 50.000$ e $Sc = 1.2$. Nesta figura, observa-se que os resultados obtidos para espessura da camada limite mássica apresentam ótima conformidade com o resultado apresentado por Burmeister [4], com um erro máximo de 14%.

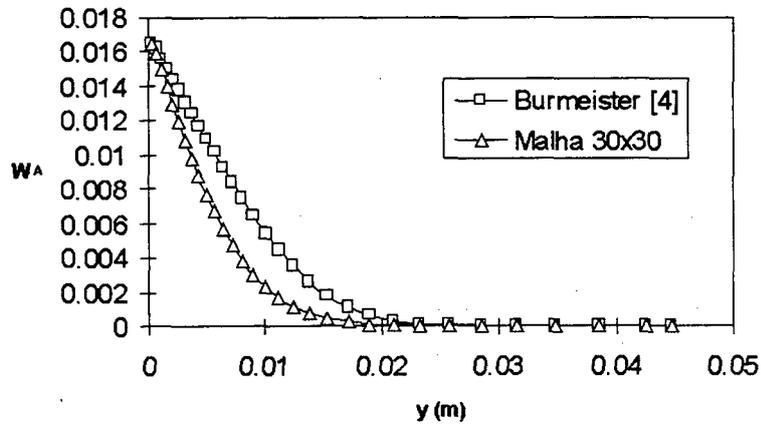


FIGURA 33 - Perfil de concentração obtido com malha 30x30, para $Re=50000$ e $Sc = 1.2$, em $x=L$

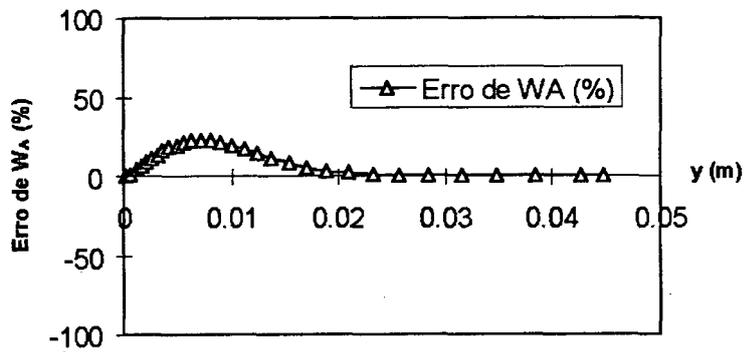


FIGURA 34 - Erro obtido no cálculo da fração mássica, calculado em relação à solução apresentada por Burmeister [4], em $x=L$.

A FIGURA 36 apresenta um gráfico dos erros obtidos no cálculo de δ_m , espessura da camada limite mássica, calculados com relação à solução apresentada por Burmeister [4].

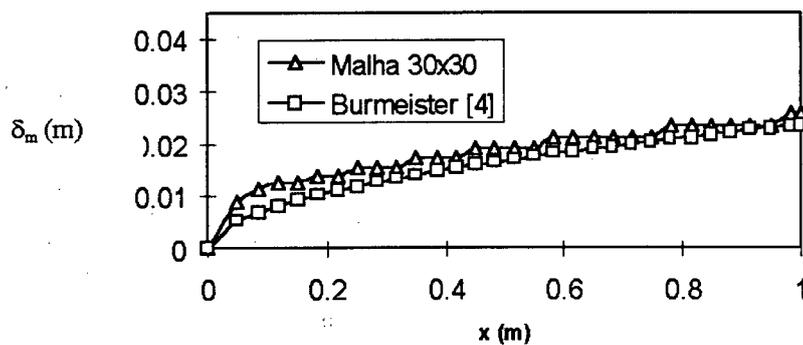


FIGURA 35 - Espessura da camada limite mássica, para $Re = 50.000$ e $Sc = 1.2$.

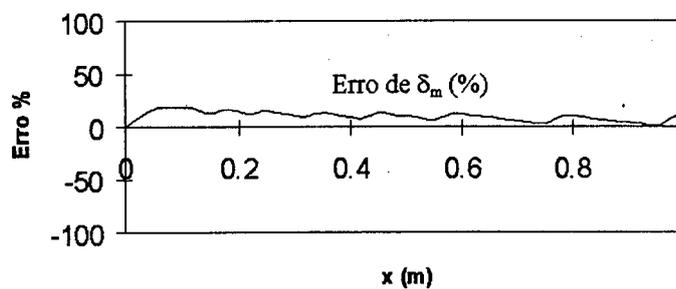


FIGURA 36 - Erro obtido no cálculo de δ_m , comparativamente à solução apresentada por Burmeister [4].

As espessuras das camadas limites mássica e hidrodinâmica são obtidas para os seguintes números de Reynolds : 25000, 50000, 75000 e 100000, mantendo-se o número de Schmidt igual a 1.2.

Nas FIGURAS 37 e 38, observa-se que os resultados obtidos para número de Reynolds mais elevados apresentam boa conformidade com os obtidos pela solução apresentada na literatura, tanto para espessura da camada limite hidrodinâmica como para a espessura da camada limite mássica.

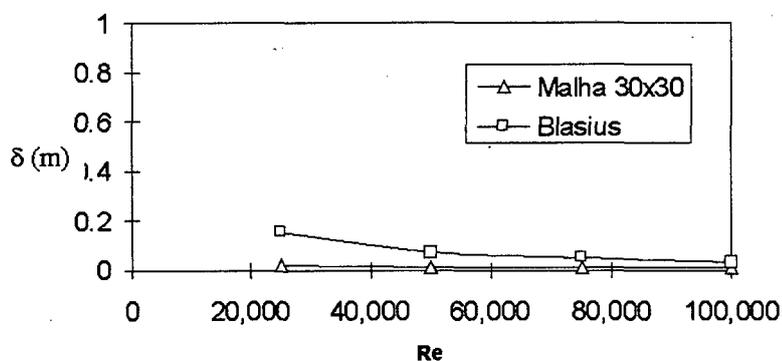


FIGURA 37 - Espessura da camada limite hidrodinâmica para vários números de Reynolds.

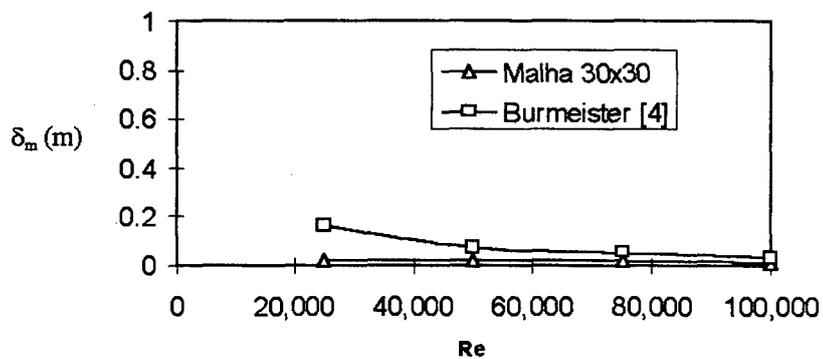


FIGURA 38 - Espessura da camada limite mássica para vários números de Reynolds, com $Sc = 1.2$.

Na FIGURA 39, são apresentadas as espessuras da camadas limite mássica para os seguintes números de Schmidt : 0.6 , 1.2, 1.9 e 2.1, mantendo-se o número de Reynolds igual a 50.000.

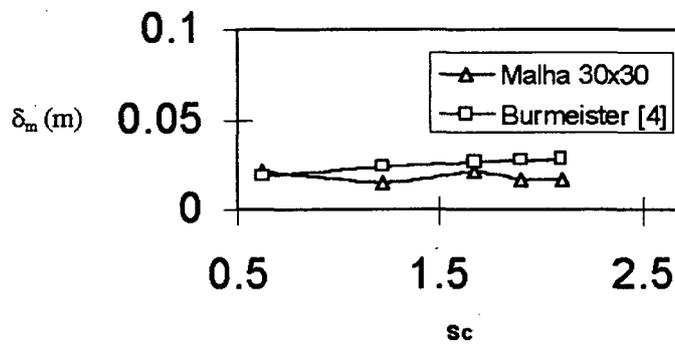


FIGURA 39 - Espessura da Camada Limite Mássica para vários números de Schmidt, com $Re = 50000$.

Analisando-se os resultados apresentados acima, pode-se concluir que o algoritmo desenvolvido resolve adequadamente problemas de escoamento de fluidos, com transferência de massa.

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Este trabalho tem como objetivo principal o desenvolvimento de um algoritmo numérico para solução de problemas envolvendo escoamento de fluidos com transferência de massa. Neste algoritmo é utilizado o Método de Volumes Finitos com o arranjo de variáveis co-localizadas na malha computacional.

O uso de variáveis co-localizadas foi adotado neste trabalho com o objetivo de tornar mais simples o programa computacional, pois o arranjo de variáveis co-localizadas apresenta um único conjunto de volumes de controle para a realização dos balanços de conservação. Isto resulta em grande economia de tempo de processamento, ou seja, reduz a memória computacional necessária para o armazenamento das variáveis do problema, comparativamente ao arranjo de variáveis desencontradas.

Com o objetivo de se testar o algoritmo desenvolvido, foram resolvidos alguns problemas, cujas soluções encontram-se bem estabelecidas na literatura.

A solução do problema isotérmico de difusão em uma cavidade quadrada, obtida utilizando-se a formulação proposta, para malha 30x30 e 40x40, apresenta um erro máximo relativo na fração mássica inferior a 2.0 %, respectivamente, o que mostra uma boa concordância entre os resultados obtidos a partir da metodologia numérica, comparados com os resultados obtidos pela solução apresentada na literatura.

O problema de transferência de massa por difusão, através da sublimação de uma esfera de naftaleno no ar, é resolvido utilizando-se coordenadas generalizadas,

com malha 40x40. O erro relativo máximo obtido no cálculo da fração mássica, comparativamente à solução analítica, é de 6.0 %.

Conforme os resultados obtidos, no problema de difusão em uma cavidade quadrada e sublimação de uma esfera de naftaleno, pode-se verificar que o algoritmo numérico fornece resultados bastantes precisos para problemas de difusão mássica.

A formulação proposta é empregada em problemas com convecção forçada. O estudo da transferência de massa devido à evaporação de um líquido volátil é realizado em uma cavidade quadrada, onde a parede superior se movimenta com velocidade constante.

Os resultados obtidos, com malha 30x30, considerando-se a hipótese de sistema isotérmico são comparados com os resultados apresentados por Prata et. al. [15], que resolveram o problema térmico acoplado ao problema hidrodinâmico, sendo que o erro máximo obtido foi de 24.64 %, para o maior número de Reynolds testado, onde a convecção é predominante.

A solução do problema do escoamento sobre uma placa plana com transferência de massa é obtida com malha 30x30, sendo que o perfil de concentração, assim como, a espessura da camada limite mássica apresenta um erro máximo de 22 % e 14 %, respectivamente, comparativamente à solução apresentada na literatura, na região concentrada próxima a placa plana, região onde os gradientes de velocidade e concentração são mais acentuados. É analisada ainda, a influência do número de Schmidt e do número de Reynolds sobre a espessura da camada limite mássica.

Analisando-se os resultados obtidos a partir da solução dos problemas propostos, conclui-se que o algoritmo implementado resolve eficientemente problemas envolvendo escoamento de fluidos com transferência de massa.

Como sugestão para trabalhos futuros, indico a implementação de funções de interpolação mais elaboradas, com o objetivo de minimizar os erros de difusão numérica.

Outra sugestão é o desenvolvimento de um algoritmo para a solução de problemas envolvendo escoamento de fluidos, com transferência de massa entre vários componentes, com a presença de reação química, onde será necessária a solução simultânea das equações da conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química para cada componente presente na mistura, levando-se em conta a cinética das reações envolvidas.

9 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Bennett, C. O. e Myers, J. E., Fenômenos de Transporte, Quantidade de Movimento, Calor e Massa, Editora McGRAW-HILL, 1978
- [2] Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., Transport Phenomena, Editora John Wiley & Sons, New York, 1960.
- [3] Bortoli, A. L. de, O uso de variáveis co-localizadas na solução de escoamentos supersônicos sobre corpos de geometrias arbitrárias, Tese de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Mecânica, 1990.
- [4] Burmeister, L. C., Convective Heat Transfer, Editora John Wiley & Sons, New York, 1983.
- [5] Ghia, K.H., Ghia, U. and Shin, C.T., High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multi-Grid Method, Journal of Computational Physics, 48, pp. 387-411, 1982.
- [6] Himmelblau, D. M., Engenharia Química - Princípios e Cálculos, Editora Prentice-Hall do Brasil Ltda, 1982.
- [7] King, C. J., Processos de Separación, Editorial Reverté, S. A., 1980.
- [8] Majumdar, S., Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Non-Staggered Grids, Numerical Heat Transfer, 13, pp. 125-132, 1988.

- [9] Maliska, C.R., A Solution Method for Three-dimensional Parabolic Fluid Flow Problems in Non-orthogonal Coordinates, Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Canada, 1981.
- [10] Maliska, C. R., Solução Numérica de Problemas de Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos em Coordenadas Generalizadas, I ENCIT, Rio de Janeiro-RJ, 1986.
- [11] Marchi, C.H., Maliska, C.R. and Bortoli, A.L., The Use of Co-located Variables in the Solutions of Supersonic Flows, COBEM 89 - X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 1989.
- [12] Patankar, S.V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Cooperation, Washington, DC., USA, 1980.
- [13] Patankar, S. V. and Spalding, D. B., A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flow, International Journal of Heat and Mass Transfer, 15, pp 1787-1806, 1972.
- [14] Peric, M., Kessler, R. and Scheuerer, G., Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Co-located Grids, Computers and Fluids, 16, pp. 389-403, 1988.
- [15] Prata, A.T. and Sparrow, E.M., Evaporative Mass and Heat Transfer from a Lid-Driven Cavity, Numerical Heat Transfer, 13, pp. 27-48, 1988.
- [16] Raithby, G. D., Prediction of Dispersion by Surface Discharge, Basin Investigation and Modelling Section, Canada Centre for Inland Waters, Burlington, Ontario, Canadá, 1976.

- [17] Raithby, G. D., Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow, Comp. Meth. Applied Mech. Eng., 9, pp. 153-164, 1976.
- [18] Raithby, G. D. and Schneider, G. E., Numerical Solution of Problems in Incompressible Fluid Flow : Treatment of the Velocity-Pressure Coupling, Numerical Heat Transfer, 2, pp 417-440, 1979.
- [19] Raithby, G. D. and Torrance, K. E., Upstream-Weighted Differencing Schemes and their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow, Computer and Fluids, 2, pp 191-206, 1974.
- [20] Roache, P.J., Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers, Albuquerque, N.M., USA, 1976.
- [21] Schlichting, H., Boundary-Layer Theory, Editora McGRAW-HILL, New York, 1968.
- [22] Schneider, G. E., A Novel Co-located Finite Difference Procedure for the Numerical Computation of Fluid Flow, AIAA - 4th Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference, Boston, Massachusetts, 1986.
- [23] Schneider, G. E. and Zedan, M., A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems, Numerical Heat Transfer, 4, pp. 1-19, 1981.
- [24] Shih, T. M., Tan, C. H. and Hwang, B. C., Effects of Grid Staggering on Numerical Schemes, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 9, pp 193-212, 1989.
- [25] Silva, A. F. C., Um Procedimento em Volumes Finitos para a Solução de Escoamentos de Qualquer Velocidade, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Departamento de Engenharia Mecânica, 1991.

- [26] Smith, J. M. and Van Ness, H. C., Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, Editora Guanabara Dois S. A., 1980.
- [27] Spalding, D. B., A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expression Involving Both First and Second Derivative, Int. Journal Num. Meth. Eng., 4, pp 551-559, 1972.
- [28] Treybal, R. E., Operaciones con Transferencia de Masa, Editorial Hispano Americana S. A., Buenos Aires, 1973.
- [29] Ulson de Souza, A. A., Um Esquema para Minimização da Difusão Numérica na solução de escoamentos em Geometrias Arbitrárias, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.
- [30] Ulson de Souza, S.M.A.G., Um Esquema Numérico Utilizando Variáveis Colocalizadas com Função de Interpolação Completa para a Solução de Problemas de escoamentos de Fluidos, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.
- [31] Valle, J. A. B., Medeiros, S. H. W. e Ulson de Souza, S. M. A. G., Aplicação do Método de Volumes Finitos na Solução de Problemas de Mecânica dos Fluidos com Transferência de Massa, XV CILAMCE, Belo Horizonte-MG, 1994.
- [32] Van Doormaal, J. P. and Raithby, G.D., Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows, Numerical Heat Transfer, 7, pp. 147-163, 1984.
- [33] Welty, J. R., Wicks, C. E. and Wilson, R. E., Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer, Editora John Wiley & Sons, 1984.

EQUAÇÃO PARA CORREÇÃO DA PRESSÃO

No Capítulo 3, é obtida a equação para correção da pressão (equação (104)), utilizando-se o método SIMPLEC, que é expressa por

$$a_p^P P_p = a_E^P P_E + a_W^P P_W + a_N^P P_N + a_S^P P_S + a_{NE}^P P_{NE} + a_{NW}^P P_{NW} + a_{SE}^P P_{SE} + a_{SW}^P P_{SW} + b_p^P \quad (\text{A.01})$$

onde

$$a_E^P = \rho_e \alpha_e d_e^u - \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} + \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (\text{A.02})$$

$$a_W^P = \rho_w \alpha_w d_w^u + \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} - \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (\text{A.03})$$

$$a_N^P = \rho_n \alpha_n d_n^v - \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} + \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} \quad (\text{A.04})$$

$$a_S^P = \rho_s \alpha_s d_s^v + \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} - \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} \quad (\text{A.05})$$

$$a_{NE}^P = -\frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} - \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} \quad (\text{A.06})$$

$$a_{NW}^P = \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} + \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} \quad (\text{A.07})$$

$$a_{SE}^P = \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} + \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (\text{A.08})$$

$$a_{SW}^P = -\frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} - \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (\text{A.09})$$

$$b_p^P = -\rho_e U_e^* + \rho_w U_w^* - \rho_n U_n^* + \rho_s U_s^* \quad (\text{A.10})$$

e,

$$a_p^P = a_E^P + a_W^P + a_N^P + a_S^P + a_{NE}^P + a_{NW}^P + a_{SE}^P + a_{SW}^P \quad (\text{A.11})$$

Os coeficientes d_e^u , d_w^u , d_n^v e d_s^v podem ser dados por

$$d_e^u = \frac{d_p^u + d_E^u}{2} \quad (\text{A.12})$$

$$d_w^u = \frac{d_p^u + d_W^u}{2} \quad (\text{A.13})$$

$$d_n^v = \frac{d_p^v + d_N^v}{2} \quad (\text{A.14})$$

$$d_s^v = \frac{d_p^v + d_S^v}{2} \quad (\text{A.15})$$

onde

$$d_p^u = d_p^v = \frac{1}{a_p - \sum_{nb} a_{nb}} \quad (\text{A.16})$$

e os coeficientes a_p e $\sum_{nb} a_{nb}$ são obtidos pelas equações (72) a (80), do Capítulo 3 deste trabalho.