

3 Modelagem Matemática

Como mencionado na introdução, o objetivo do presente trabalho consiste em identificar a importância relativa dos mecanismos de difusão molecular e difusão browniana para previsão da deposição de parafina em dutos. Neste capítulo a modelagem matemática utilizada no presente trabalho para a previsão do processo de deposição de parafinas é descrito. Isto é, os dois modelos selecionados são apresentados, juntamente com as equações de conservação necessárias para a determinação do campo de velocidade, pressão, temperatura e concentração de parafina.

A influência do regime de escoamento (laminar ou turbulento) na taxa de deposição também é investigada. Para prever o regime turbulento selecionou-se um modelo de turbulência de baixo Reynolds $\kappa - \varepsilon$, modelado por Bremhorst *et al.* (1981).

Visando identificar a importância relativa dos mecanismos de deposição, os resultados das simulações são comparados com os dados experimentais detalhados, obtidos no trabalho de Leiroz (2004), para regime laminar de escoamento. Desta forma, exatamente a mesma geometria, fluidos de trabalho, condições de contorno e iniciais utilizadas no aparato experimental são utilizadas nas simulações, os quais são descritos a seguir.

3.1. Descrição do Experimento

Um esquema da seção de teste do experimento, para medir a deposição de parafina, realizado por Leiroz (2004) é ilustrado na Fig. 3.1. A seção de teste é um canal com comprimento L igual a 300 mm, com seção transversal retangular com largura $w = 3$ mm e altura $a = 10$ mm (Fig. 3.1b). Uma seção inicial de acrílico, com 40 mm de comprimento, é utilizada para garantir que o escoamento na seção de teste encontra-se hidrodinamicamente desenvolvido (Fig. 3.1a). O canal da seção de teste é formado por paredes laterais de vidro, de forma a permitir a

visualização do depósito de parafina sólida. As paredes superior e inferior são de cobre, de forma a fornecer temperatura constante ao longo do canal, devido a alta condutividade térmica do mesmo. Como explicado no capítulo anterior, a deposição da parafina ocorre quando a temperatura do fluido encontra-se abaixo da TIAC. Desta forma, as temperaturas das paredes superior e inferior do canal são controladas ao fazer escoar água proveniente de banhos termostáticos, através de canais dentro da parede de cobre. Dependendo do desejado, impõem-se temperaturas abaixo ou acima da TIAC.

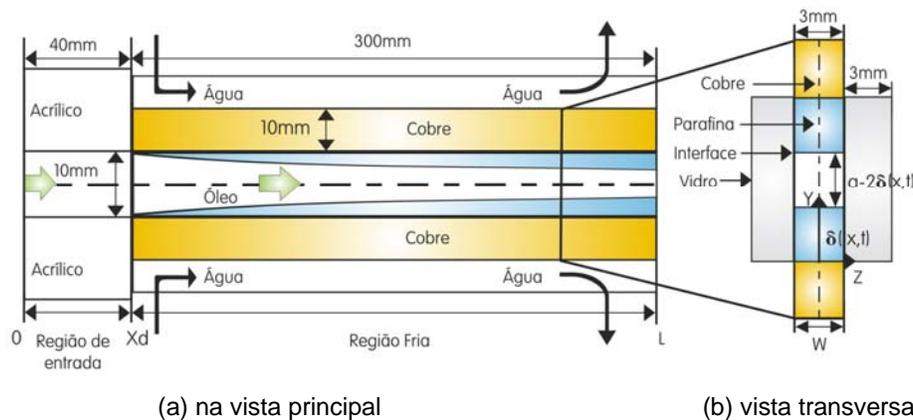


Figura 3.1: Detalhes da geometria, dimensões e materiais do canal,
a) na vista principal, e, b) na vista transversal

A temperatura de ingresso da mistura óleo/parafina na seção de teste também é controlada por um banho termostático. Utilizou-se um sistema de ciclo aberto para a circulação da mistura, de forma a garantir concentração constante na entrada ω_m . A vazão da mistura \dot{m} na entrada do canal é mantida constante durante a experiência.

A experiência se inicia fazendo circular água aquecida a T_{in} , temperatura acima da TIAC, proveniente dos banhos termostáticos, através das paredes de cobre. O óleo com a parafina dissolvida na concentração desejada ω_m é aquecido em um reservatório até atingir a mesma temperatura inicial, T_{in} , sendo introduzido no canal. A mistura escoar até alcançar o regime permanente. Neste estágio a temperatura de todo o fluido é uniforme, acima da TIAC, logo não existe deposição dentro do canal. A condição inicial para o experimento de deposição é de escoamento hidrodinamicamente desenvolvido com temperatura uniforme ao longo do canal.

Uma vez estabilizada a condição inicial, o experimento de deposição da mistura de óleo/parafina se inicia ao fazer circular água fria (temperatura abaixo da TIAC), proveniente do banho termostático, nos canais das paredes de cobre. A temperatura do cobre T_{cobre} é mantida constante, dando início ao processo de deposição da mistura de óleo/parafina, na região do cobre.

Vale notar que como o acrílico da região da entrada possui baixa condutividade térmica, este funciona como isolante entre a região de entrada quente e a parede de cobre fria, garantindo que ocorra depósito somente na região da seção de teste propriamente dita. Adicionalmente, as paredes de vidro de visualização encontram-se com temperatura acima da TIAC, próxima a temperatura do ambiente externo da sala do experimento. Dessa forma, também não ocorre deposição de parafina nestas paredes.

A mistura óleo Spindle/parafina utilizada é composta de 90% de óleo Spindle e 10% de parafina, resultando em uma concentração na entrada $\omega_{in} = 0,1$. Para esta mistura, nesta concentração, a temperatura inicial de aparecimento de cristais, TIAC, é igual a 36°C . Desta forma a temperatura inicial do experimento e a utilizada na entrada do canal foi definida como sendo $T_{in} = 40^{\circ}\text{C}$. A parede fria do cobre foi mantida a $T_{cobre} = 15^{\circ}\text{C}$. Nestas experiências curvas da deposição de parafinas ao longo do canal foram obtidas, assim como dados experimentais para algumas propriedades importante da parafina, descritas a seguir.

3.1.1.

Massa específica da mistura óleo Spindle/parafina

A Figura 3.2 ilustra a variação da massa específica da mistura ρ_m com a temperatura T para a mistura óleo Spindle/parafina utilizada nos experimentos. Observa-se que a variação da massa específica é pequena, da ordem do 1,5%, com relação à faixa de temperatura estudada. A equação que melhor ajusta os dados experimentais, com a temperatura dada em graus Celsius é:

$$\rho_m = 862 - 0,495 T \quad (3.1)$$

Considerando uma temperatura de referência, como sendo o valor médio entre as temperaturas máxima e mínima do experimento $(T_{in} + T_{cobre})/2 = 27,5^{\circ}\text{C}$, a massa específica da mistura de referência é igual a $\rho_m = 848,4 \text{ kg/m}^3$.

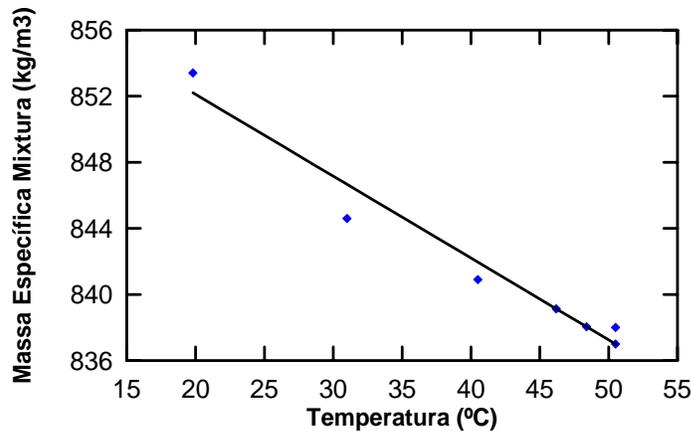


Figura 3.2: Curvas da variação da massa específica da mistura óleo Spindle/parafina com a temperatura (°C). Traçado de uma linha de ajuste a os dados experimentais obtidos por Leiroz (2004).

3.1.2. Solubilidade da parafina

A curva de solubilidade da parafina na mistura é um parâmetro muito importante. Leiroz (2004) mediu experimentalmente a concentração de saturação da solução óleo/parafina dada em gramas de soluto por grama de solução ω_{sol} (g/g) em função da temperatura T (°C), como mostra a Fig. 3.3.

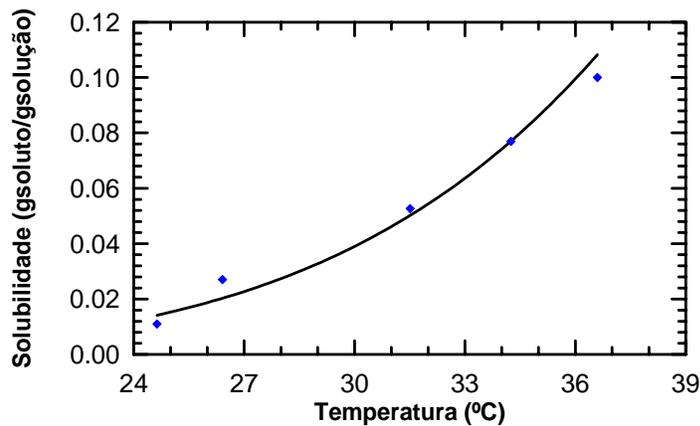


Figura 3.3: Curvas da variação da solubilidade da mistura óleo/parafina, com a temperatura (°C). Traçado da curva de ajuste dos dados experimentais obtidos por Leiroz (2004).

A equação que melhor ajusta os dados experimentais é:

$$\omega_{sol} = 1,021 \times 10^{-9} \times T^{5,133} \quad (3.2)$$

3.2. Modelagem do Crescimento do Depósito de Parafina

Deposição de parafinas faz parte de uma classe de problemas transientes de transferência de calor e massa conhecida como problemas de fronteira móvel. A solução desta classe de problemas envolve uma dificuldade inerente ao processo que é o movimento da interface entre as fases sólida e líquida. Este movimento está relacionado com os mecanismos de deposição. Como consequência, a localização da interface sólido/líquido não é conhecida, a priori, tornando-se parte da solução, conforme ilustrado na Fig. 3.4. A região líquida encontra-se acima da interface, e a região sólida abaixo da interface. A região onde ocorre deposição de parafina corresponde à região da parede de cobre, a qual possui temperatura constante abaixo da TIAC.

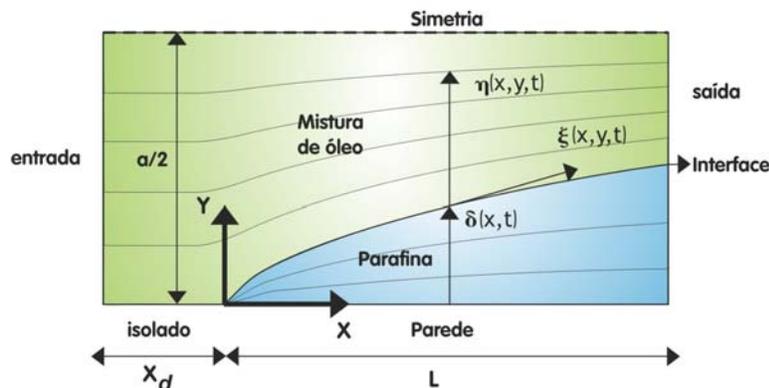


Figura 3.4: Esquema do domínio computacional e dos eixos coordenado.

Para determinar a taxa de deposição de parafina, os modelos de difusão molecular e difusão browniana foram selecionados para serem investigados e são descritos a seguir.

3.2.1. Mecanismos de difusão molecular e difusão browniana

Ambos os mecanismos de deposição por difusão molecular e difusão browniana podem ser modeladas pela lei de Fick, onde o fluxo de massa depositada \dot{m}_p é função do gradiente de concentração ω na direção normal à superfície, avaliado na interface, $\partial \omega / \partial n|_{int}$.

O fluxo de massa depositada, \dot{m}_p , avaliada na interface entre a parafina sólida depositada e a mistura óleo/parafina é determinado de acordo com

$$\dot{m}_p = \rho_m D_m A_d \left. \frac{\partial \omega_m}{\partial n} \right|_{\text{int}} + \rho_s D_b A_d \left. \frac{\partial \omega_p}{\partial n} \right|_{\text{int}} \quad (3.3)$$

O primeiro termo do lado direito é devido à difusão molecular e o segundo corresponde à deposição por difusão browniana respectivamente. $\dot{m}_p = dm_p / dt$ é o fluxo de massa, i.e., é a variação da massa depositada de parafina m_p com o tempo t . Ambos os fluxos de difusão são avaliados de acordo com a Lei de Fick, sendo os gradientes das concentrações da parafina em solução ω_m e fora da solução ω_p avaliados na interface do depósito, na direção normal n à mesma. ρ_s é a massa específica da partícula de parafina e ρ_m é a massa específica da mistura óleo/parafina, D_m e D_b são os coeficientes de difusão molecular e difusão browniana, respectivamente. A_d é a área superficial do depósito.

A difusão browniana é modelada pelo coeficiente de difusão de Stokes-Einstein (William, 1982).

$$D_b = \frac{K_B T}{3\pi d_p \mu} \quad (3.4)$$

onde $K_B = 1,381 \times 10^{-23}$ J/K é a constante de Boltzmann, d_p é o diâmetro da partícula, μ é a viscosidade molecular.

A massa do depósito m_p depende do volume de parafina dV na matriz porosa, $dV = (1 - \phi^*) A_t \delta$, onde δ é a espessura do depósito, A_t é a área da seção transversal e ϕ^* é a porosidade do depósito de parafina. De um modo geral, a porosidade é variável ao longo do canal, e deve ser avaliada experimentalmente. A área superficial do depósito é aproximadamente igual a área transversal do escoamento ($A_d \cong A_t$). Na ausência de dados experimentais e visando simplificar o modelo, neste trabalho a porosidade foi considerada constante. Dessa forma tem-se que o fluxo de massa depositada é diretamente proporcional a taxa de crescimento da espessura do depósito, e a massa específica da parafina sólida ρ_s ,

$$\frac{dm_p}{dt} = (1 - \phi^*) \rho_s A_d \frac{\partial \delta}{\partial t} \quad (3.5)$$

Igualando as Eqs. (3.3) e (3.5), obtém-se a equação geral para determinar o crescimento do depósito como:

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = \frac{-D_m}{(1-\phi^*)} \frac{\rho_m}{\rho_s} \left(\frac{\partial \omega_m}{\partial n} \right)_{\text{int}} + \frac{-D_b}{(1-\phi^*)} \frac{\rho_s}{\rho_s} \left(\frac{\partial \omega_p}{\partial n} \right)_{\text{int}} \quad (3.6)$$

De acordo com a Eq. (3.6), conhecidas as propriedades da mistura óleo/parafina e da parafina sólida, a taxa de crescimento do depósito depende do gradiente de concentração da parafina em solução e do gradiente de partículas na direção normal à interface. Dessa forma, é preciso determinar estas duas grandezas. Adicionalmente, a deposição só ocorre se a temperatura cair abaixo da TIAC, tornando-se necessário a determinação do campo de temperatura. Como a concentração de parafina assim como a temperatura dependem do campo de velocidade, este também precisa ser determinado. As equações de conservação necessárias para a determinação das variáveis mencionadas encontram-se no próximo item.

3.3. Equações de Conservação

As equações de conservação do movimento são escritas impondo-se a condição quasi-estacionária na região líquida. Isto é, supõe-se que o movimento da interface não afeta o escoamento da substância na face líquida, então o processo de mudança de fase pode ser representado como uma sucessão de processos quasi-estáticos, onde as equações do movimento são resolvidas com a interface fixa. No entanto, à medida que o tempo passa, o aumento do depósito de parafina diminui a área transversal do duto retangular, aumentando a velocidade média u_m do escoamento.

O fenômeno físico do problema em questão é governado pelas equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia, concentração da mistura óleo/parafina, concentração das partículas sólidas fora da solução. Considerou-se situações com regime de escoamento laminar e turbulento. Nos casos em que o regime de escoamento é turbulento, médias temporais das equações do movimento são empregadas. Embora as informações sobre as menores escalas do escoamento turbulento sejam relevantes, na maioria das simulações de escoamentos industriais, é suficiente uma descrição do escoamento médio. Para o caso de escoamento no regime turbulento, utilizou-se o modelo κ - ε de baixo Reynolds de Bremhorst *et al.* (1981).

Selecionou-se um sistema de coordenadas (ξ, η) que se adapta a interface líquido/sólido, conforme ilustrado na Fig 3.4, onde a interface consiste da coordenada $\eta(x, t) = 0$. A coordenada η é alinhada com a direção y e a coordenada ξ é tangente á superfície do depósito, i.e., o sistema de coordenadas adotado é tal que

$$\bar{e}_\xi = \frac{\partial \delta}{\partial x} \bar{e}_x + \sqrt{1 - \left(\frac{\partial \delta}{\partial x}\right)^2} \bar{e}_y \quad ; \quad \bar{e}_\eta = \bar{e}_y \quad (3.7)$$

sendo

$$\xi = \frac{x - x_d}{L + x_d} \quad ; \quad \eta = \frac{y - \delta(x, t)}{a/2 - \delta(x, t)} \quad ; \quad \tau = t \quad (3.8)$$

De acordo com análises anteriores (Leiroz, 2004), verificou-se que a deposição por gravidade é desprezível, desta forma, pode-se considerar que existe uma simetria em relação ao plano horizontal que passa pelo meio do canal. Dessa forma é suficiente utilizar como domínio de solução somente metade do canal, conforme ilustrado na Fig. 3.4.

Uma vez que as paredes laterais do canal de vidro não são resfriadas, os gradientes de temperatura na direção z são muito menores que os gradientes verticais, nas paredes de cobre. Conseqüentemente, para facilitar a obtenção da solução, desprezou-se as variações na direção z e utilizou-se uma modelagem bi-dimensional.

As hipóteses consideradas são as seguintes:

- deposição de parafina governada por os mecanismos de difusão molecular e difusão browniana;
- fluido Newtoniano;
- fluido incompressível, com viscosidade absoluta constante;
- condutividade térmica e calor específico a pressão constante do fluido e da parafina iguais e constantes;
- coeficiente de difusão molecular e difusão browniana da parafina constante;
- solubilidade da parafina depende da temperatura, de acordo com a curva dada pela Eq. (3.2);
- sem geração de energia;
- efeito gravitacional desprezível;

- com geração de partículas sólidas devido ao gradiente de concentração;
- depósito de parafina sólida com porosidade constante;
- perda de calor pelas paredes de vidro desprezível;
- região de acrílico considerada adiabática;
- escoamento bidimensional, desprezando as variações na direção transversal ao escoamento z , devido ao fluxo nulo de calor nas paredes laterais de vidro;
- calor latente liberado na formação das partículas sólidas e do depósito na parede desprezado.
- desconsiderou-se a variação de concentração da parafina líquida devido a formação de partículas sólidas.

Com as hipóteses mencionadas, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento linear, energia, conservação de massa da parafina dissolvida e das partículas sólidas podem ser escritas como:

$$\operatorname{div} \vec{u} = 0 \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho_m \vec{u} \vec{u}) &= -\operatorname{grad}(p) + \\ + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} \vec{u}) &+ \operatorname{div}(\mu (\operatorname{grad} \vec{u})^T) \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\operatorname{div}(\rho_m \vec{u} T) = \operatorname{div}(\mu / \operatorname{Pr}_t) \operatorname{grad} T \quad (3.11)$$

$$\operatorname{div}(\rho_m \vec{u} \omega_m) = \operatorname{div}(\mu / \operatorname{Sc}) \operatorname{grad} \omega_m \quad (3.12)$$

$$\operatorname{div}(\rho_m \vec{u} \omega_p) = \operatorname{div}(\mu / \operatorname{Sc}_p) \operatorname{grad} \omega_p + R_p \quad (3.13)$$

Nas equações acima \vec{u} é o vetor velocidade, p é a pressão, ρ_m é massa específica da mistura, e μ é a viscosidade absoluta. T é a temperatura, ω_m e ω_d são as concentrações da parafina dissolvida na solução e concentração da partículas sólidas fora da solução. R_p é a taxa de geração de partículas sólidas por unidade de massa de solução. **Pr** e **Sc** correspondem ao número de Prandtl e Schmidt,

respectivamente, definidos por

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{k} \quad ; \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho_m D_m} \quad ; \quad \text{Sc}_p = \frac{\mu}{\rho_m D_b} \quad (3.14)$$

sendo c_p o calor específico a pressão constante e k a condutividade térmica. D_m e D_b são os coeficientes de difusão molecular e difusão browniana, respectivamente.

3.3.1. Propriedades termofísicas

Leiroz (2004) determinou experimentalmente as propriedades termofísicas da mistura utilizadas no seu experimento. A partir destes dados, Romero (2005) obteve valores médios de referência, os quais foram utilizados em suas simulações numéricas e no presente trabalho. O resumo dos valores das propriedades encontram-se listados abaixo:

- mistura:
 - massa específica: 848,4 kg/m³,
 - condutividade térmica: 0,23 W/mK,
 - calor específico a pressão constante: 2018 J/kg K,
 - viscosidade dinâmica: 0,0102 Pa.s,
 - difusão molecular: $2,09 \times 10^{-10}$ m²/s;
- parafina:
 - massa específica: 848,4 kg/m³,
 - condutividade térmica: 0,23 W/mK,
 - calor específico a pressão constante: 2018 J/kg K,
- cobre:
 - massa específica: 8920 kg/m³,
 - condutividade térmica: 401 W/mK,
 - calor específico a pressão constante: 383 J/kg K,

Na falta de dados levantados experimentalmente, alguns parâmetros precisaram ser estimados, e são apresentados a seguir. Considerou-se um valor típico de porosidade, de acordo com os trabalhos de Leiroz (2004) e Romero (2005). Para a determinação do coeficiente de difusão browniano pela Eq. (3.4),

estimou-se o diâmetro das partículas sólidas e considerou-se a temperatura média do escoamento.

- porosidade: 0,86
- diâmetro da partícula sólida formada: $1\mu\text{m}$
- temperatura média $(T_{in} + T_{cobre})/2$: $27,5\text{ }^\circ\text{C}$
- coeficiente de difusão browniano é $4,32 \times 10^{-14}\text{ m}^2/\text{s}$.

3.3.2. Modelagem do escoamento turbulento

Para modelar o escoamento turbulento, considerou-se a média de Reynolds, isto é, qualquer propriedade do escoamento pode ser expressa por uma grandeza média somada a uma flutuação associada à turbulência. Para uma grandeza física aleatória do escoamento temos:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (3.15)$$

onde Φ representa uma grandeza física aleatória do escoamento, Φ' a flutuação da grandeza em torno da média. e $\bar{\Phi}$ a grandeza média, dada por:

$$\bar{\Phi}(t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0 - \Delta t/2}^{t_0 + \Delta t/2} \Phi(t) dt \quad (3.16)$$

Aplicando-se a média de Reynolds às equações de conservação, surgem correlações envolvendo flutuações de velocidade u'_i , de temperatura T' e concentração ω' . Estes novos termos são interpretados como fluxos turbulentos adicionais. Ou seja, na equação de Navier-Stokes o único termo relacionado à turbulência que permanece é o tensor de Reynolds dado por:

$$\tau_{ij} = -\rho_m \overline{u'_i u'_j} \quad (3.17)$$

enquanto que na equação da energia e de concentração, aparecem os seguintes fluxos turbulentos

$$q_i / c_p = -\rho_m \overline{u'_i T'} \quad \text{e} \quad \dot{m}_{t,i} = -\rho_m \overline{u'_i \omega'} \quad (3.18)$$

A tensão de Reynolds e os fluxos turbulentos são devido as interações entre

as flutuações no campo de escoamento. Equações adicionais são necessárias para definir essas grandezas. Diferentes abordagens podem ser empregadas na determinação das tensões de Reynolds e fluxos turbulentos. No presente trabalho selecionou-se o Modelo de Viscosidade Turbulenta.

O modelo de viscosidade turbulenta é baseado no conceito da viscosidade turbulenta introduzido por Boussinesq em 1877 (Pope, 2000). Neste conceito a tensão de Reynolds é associada ao aumento da resistência à deformação média provocado pela turbulência do escoamento, ou seja, a presença da turbulência manifesta-se num aumento aparente da viscosidade do fluido. Boussinesq propõe para o núcleo turbulento uma analogia entre as tensões turbulentas e as tensões existentes no regime laminar, logo, a tensão turbulenta é definida como:

$$-\rho_m \overline{u_i u_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} - \frac{2}{3} \rho_m \kappa \delta_{ij} \quad (3.19)$$

onde μ_t é a viscosidade turbulenta. No caso de fluido incompressível, o segundo termo do lado direito é nulo, de acordo com a equação da continuidade. O termo $(\rho_m \kappa)$ é introduzido na equação para representar a pressão dinâmica associada aos turbilhões, em analogia à pressão estática termodinâmica, κ é a energia cinética turbulenta, definida como

$$\kappa = \frac{1}{2} \overline{u_i^2} = \frac{1}{2} \left(\overline{u^2} + \overline{v^2} + \overline{w^2} \right) \quad (3.20)$$

Os fluxos de energia e concentração turbulentos também são definidos através de analogia com os fluxos laminares, de acordo com

$$\frac{q_i}{c_p} = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \left(\frac{\partial T}{\partial x_j} \right); \dot{m}_i = \frac{\mu_t}{\sigma_{sc}} \left(\frac{\partial \omega_m}{\partial x_j} \right); \dot{m}_{p,i} = \frac{\mu_t}{\sigma_{sc}} \left(\frac{\partial \omega_p}{\partial x_j} \right) \quad (3.21)$$

onde σ_t e σ_{sc} são os números de Prandtl e Schmidt turbulentos, respectivamente.

As equações de conservação turbulentas, utilizando as médias de Reynolds são:

$$\text{div } \vec{\bar{u}} = 0 \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho_m \bar{u} \bar{u}) &= -\operatorname{grad} \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \rho_m \kappa \right) + \\ &+ \operatorname{div}((\mu + \mu_t) \operatorname{grad} \bar{u}) + \operatorname{div}((\mu + \mu_t)(\operatorname{grad} \bar{u})^T) \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\operatorname{div}(\rho_m \bar{u} \bar{T}) = \operatorname{div}((\mu / \operatorname{Pr} + \mu_t / \sigma_t) \operatorname{grad} \bar{T}) \quad (3.24)$$

$$\operatorname{div}(\rho_m \bar{u} \bar{\omega}_m) = \operatorname{div}((\mu / \operatorname{Sc} + \mu_t / \sigma_{sc}) \operatorname{grad} \bar{\omega}_m) \quad (3.25)$$

$$\operatorname{div}(\rho_m \bar{u} \bar{\omega}_p) = \operatorname{div}((\mu / \operatorname{Sc}_p + \mu_t / \sigma_{sc}) \operatorname{grad} \bar{\omega}_p) + R_p \quad (3.26)$$

As Eqs (3.22) e (3.26) não constituem um modelo de turbulência por si só, mas é a base para a construção de um grande número de modelos de turbulência simples e complexos, cujo ponto de partida é a avaliação da viscosidade turbulenta, μ_t . A viscosidade turbulenta não é uma propriedade, e sim função do escoamento. Diferentes modelos têm sido propostos para a avaliação da viscosidade turbulenta. Cada modelo apresenta um grau de complexidade diferente e com uma abrangência diferente. Dentre os modelos de turbulência para baixos Reynolds mais populares encontram-se o modelo $\kappa - \varepsilon$ de Bremhorst *et al* (1981).

O modelo de turbulência utilizado é $\kappa - \varepsilon$ de baixo Reynolds, modelado por Bremhorst *et al* (1981). Neste modelo a viscosidade turbulenta é avaliada em função de duas grandezas a turbulência, a energia cinética turbulenta κ e a taxa de dissipação cinética turbulenta ε , de acordo com

$$\mu_t = \frac{c_\mu \rho_m f_\mu \kappa^2}{\varepsilon} \quad (3.27)$$

sendo c_μ é uma constante empírica e f_μ é uma função de amortecimento, definida como

$$f_\mu = [1 - \exp(-0,0165 \operatorname{Re}_y)]^2 \left(1 + \frac{20}{\operatorname{Re}_t} \right) \quad (3.28)$$

onde Re_t e Re_y são duas formas de avaliar o número de Reynolds turbulento,

$$\text{Re}_t = \rho_m \kappa^2 / \mu \varepsilon \quad (3.29)$$

$$\text{Re}_y = \rho_m y \sqrt{\kappa} / \mu \quad (3.30)$$

As equações de transporte para a energia cinética turbulenta e para a taxa de dissipação cinética turbulenta podem ser derivadas a partir das equações de Navier-Stokes.

$$\text{div}(\rho_m \bar{\bar{u}} \kappa) = \text{div}(\mu + (\mu/\sigma_\kappa) \text{grad } \kappa) + P_\kappa - \rho_m \varepsilon \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \text{div}(\rho_m \bar{\bar{u}} \varepsilon) = & \text{div}(\mu + (\mu/\sigma_\varepsilon) \text{grad } \varepsilon) + \\ & + (\varepsilon/\kappa) [c_{1\varepsilon} f_1 P_\kappa - \rho_m c_{2\varepsilon} f_2 \varepsilon] \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde c_μ , $c_{1\varepsilon}$, $c_{2\varepsilon}$, σ_κ e σ_ε são constante empíricas do modelo de Bremhorst *et al* (1981), e são iguais a: $c_\mu=0,09$; $c_{1\varepsilon}=1,44$; $c_{2\varepsilon}=1,92$; $\sigma_\kappa=1,0$ e $\sigma_\varepsilon=1,30$. f_1 e f_2 são funções de amortecimento, definidas como

$$f_1 = 1 + \left(\frac{0,055}{f_\mu} \right)^3 \quad ; \quad f_2 = 1 - \exp(-\text{Re}_t^2) \quad (3.33)$$

P_κ é a produção da energia cinética turbulenta, sendo igual a

$$P_\kappa = \mu_t [\text{grad } \bar{\bar{u}} + (\text{grad } \bar{\bar{u}})^T] \circ \text{grad } \bar{\bar{u}} \quad (3.34)$$

3.4. Geração de Partículas Sólidas

A criação de partículas sólidas ocorre devido à cristalização da parafina dissolvida, a qual assim como a deposição da parafinas depende de variações de pressão e temperatura.

3.4.1. Solubilidade e supersaturação

A existência da supersaturação no meio é um requisito essencial para que

ocorra o processo de cristalização. A supersaturação é a principal variável que influencia o mecanismo da cristalização, sendo definida por Alves (1999) da seguinte forma:

$$\Delta\omega_m = \left(\frac{d\omega_{sol}}{dT} \right) \Delta T \quad ; \quad \Delta T = TIAC - T \quad (3.35)$$

onde $d\omega_{sol}/dT$ é a derivada da curva de solubilidade na mistura, Eq. (3.2), ΔT é o grau de subresfriamento, onde T é a temperatura da mistura e $TIAC$ é a temperatura inicial de aparecimento de cristais de parafina.

Um diagrama de solubilidade-supersaturação é ilustrado na Fig. 3.5 (Alves, 1999), onde pode-se distinguir três regiões. A primeira, abaixo da curva de solubilidade, apresenta uma região "estável", onde a cristalização é impossível, a curva de solubilidade pode ser localizada com precisão. A segunda região é designada como "metaestável", nesta região a supersaturação da solução não é muito alta, e a taxa de formação de novos cristais é baixa, podendo ser considerada desprezível. A última região "instável" é dominada pelo aumento exponencial da quantidade de cristais de parafina formados.

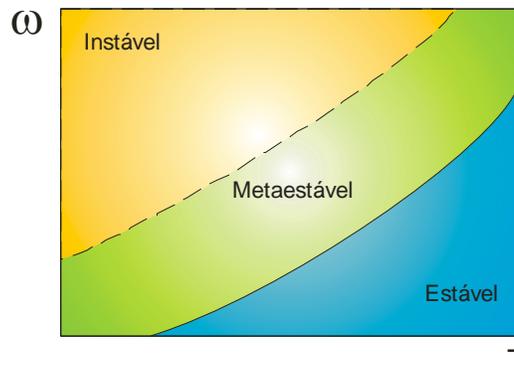


Figura 3.5: Diagrama solubilidade-supersaturação (Alves, 1999).

A curva de supersolubilidade que define o limite entre a zona metaestável e instável, não pode ser tão bem definida quanto a curva de solubilidade. A posição no diagrama, ou seja, a largura da zona metaestável é consideravelmente afetada por um número de fatores entre os quais estão: temperatura, propriedades físicas da solução, presença de aditivos solúveis, taxa na qual a supersaturação é gerada, intensidade da agitação, campos elétricos e magnéticos, ondas sônicas e ultrasônicas, luz ultravioleta, raios X, etc. De acordo com os dados experimentais

obtidos por Alves (1999), ao resfriar uma amostra da mistura óleo/parafina, não verificou-se distinção entre a região de supersaturação e a região instável, optou-se então por considerar uma região só.

3.4.2. Nucleação

Uma consideração simplificada da formação de núcleos de cristais de parafina é relacionada com o nível de supersaturação. A relação conhecida como Lei das Potências é freqüentemente utilizada para correlações de dados de nucleação:

$$\dot{N}_N = k_N \Delta\omega_m^n \quad (3.36)$$

onde \dot{N}_N é a taxa de nucleação, k_N corresponde à constante cinética de nucleação, n é o expoente cinético de nucleação e $\Delta\omega_m$ é a supersaturação da mistura óleo/parafina.

Neste estudo só se levou em conta a geração do cristal de parafina pelo fenômeno da nucleação, não se levou em conta o processo de crescimento dos cristais formados na aglomeração dos mesmos. Na falta de dados experimentais para a taxa de nucleação e curva de supersaturação para a mistura utilizada por Leiroz (2004), utilizou-se os dados experimentais de Alves (1999), correspondentes a uma outra parafina, porém com propriedades similares.

A experiência para gerar curva de supersaturação (Alves, 1999), foi realizada com a mistura óleo parafina numa cavidade fechada com dimensões conhecidas e impondo um gradiente de temperatura ao resfriar uma parede do recipiente. Sendo a taxa de resfriamento constante e conhecida, e conhecendo a temperatura da mistura no instante em que foi tirada a fotografia; é possível gerar a curva de supersaturação; já que as fotografias mostram a quantidade de cristais formados num volume conhecido e num intervalo de tempo conhecido.

Para determinar a taxa de nucleação foi utilizada a seguinte fórmula:

$$\dot{N}_N = \frac{n_{cristais}}{m_{solução} \Delta t_{nuclea}} \quad (3.37)$$

onde $n_{cristais}$ é o número de cristais presentes em cada fotografia tirada, $m_{solução}$ é a massa da solução onde foi registrado o número de cristais ($m_{solução} = \rho_m \forall_{solução}$) e

Δt_{nuclea} é o tempo transcorrido entre o instante inicial de aparecimento de cristais e o instante em que foi tirada a fotografia. Conhecidas as duas temperaturas correspondentes aos dois instantes de tempo, e com a utilização da taxa de resfriamento constante, é possível determinar Δt_{nuclea} .

Conhecendo a taxa de nucleação (Eq. 3.37) e o nível de supersaturação (Eq. 3.35) é possível determinar os coeficientes da Eq. (3.36), fazendo um ajuste dos dados pela lei de potência como mostra a Fig. 3.6. A equação resultante é

$$\dot{N}_N = 3,718 \times 10^{14} \Delta \omega_m^{1,993} \quad (3.38)$$

onde \dot{N}_N é a taxa de nucleação, e $\Delta \omega_m$ é o nível de supersaturação.

A geração de cristais de parafina por unidade de volume de solução $S\omega_p$ a ser utilizada na Eq. (3.26) é

$$S\omega_p = \rho_p \nabla_p (\rho_m \dot{N}_N) \quad (3.39)$$

onde ρ_p é a massa específica da partícula e ∇_p é o volume da partícula de diâmetro d_p .

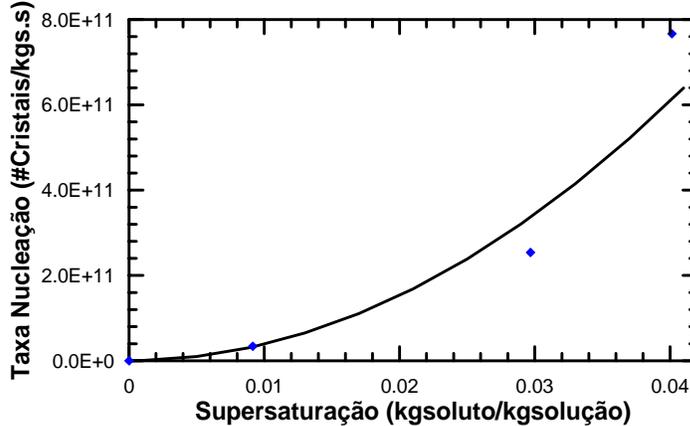


Figura 3.6: Curva da taxa de nucleação com o nível de supersaturação

3.5. Formulação em Coordenadas Curvilíneas

Para resolver o sistema de equações apresentado, utilizou-se um sistema de coordenadas bi-dimensional curvilíneo (ξ, η) , que se adapta ao contorno da interface, conforme ilustrado na Fig. 3.4. Como a frente de depósito cresce com o tempo t , este sistema de coordenadas curvilíneas é móvel. Este sistema de

coordenadas curvilíneas móvel é relacionado com o sistema cartesiano e com o tempo pelas seguintes relações:

$$\varepsilon = \varepsilon(x, y, t) \quad ; \quad \eta = \eta(x, y, t) \quad ; \quad \tau = \tau(t) \quad (3.40)$$

Os vetores unitários tangenciais \vec{e}_ξ e \vec{e}_η e normais \vec{n}_ξ e \vec{n}_η as linhas de ξ e η constantes do sistema curvilíneo se relacionam com os unitários cartesianos \vec{e}_x e \vec{e}_y de acordo com

$$\vec{e}_\xi = \frac{1}{h_\xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \vec{e}_x + \frac{\partial y}{\partial \xi} \vec{e}_y \right) \quad ; \quad \vec{e}_\eta = \frac{1}{h_\eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \vec{e}_x + \frac{\partial y}{\partial \eta} \vec{e}_y \right) \quad (3.41)$$

$$\vec{n}_\xi = \frac{1}{h_\eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \vec{e}_x - \frac{\partial x}{\partial \eta} \vec{e}_y \right) \quad ; \quad \vec{n}_\eta = \frac{1}{h_\xi} \left(-\frac{\partial y}{\partial \xi} \vec{e}_x + \frac{\partial x}{\partial \xi} \vec{e}_y \right) \quad (3.42)$$

Para escrever as equações de conservação no sistema de coordenadas curvilíneo e móvel (ξ, η, τ) é conveniente relacionar as variações com as coordenadas cartesianas (x, y, t)

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial y} \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} \quad (3.45)$$

O Jacobiano da transformação do sistema de coordenadas é:

$$Ja = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \quad (3.46)$$

Pode-se mostrar que as seguintes relações são válidas,

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{1}{Ja} \frac{\partial y}{\partial \eta} ; \quad \frac{\partial \eta}{\partial x} = -\frac{1}{Ja} \frac{\partial y}{\partial \xi} ; \quad \frac{\partial \tau}{\partial x} = 0 \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial y} = -\frac{1}{Ja} \frac{\partial x}{\partial \eta} ; \quad \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{1}{Ja} \frac{\partial x}{\partial \xi} ; \quad \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0 \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{1}{Ja} \left(v_g \frac{\partial x}{\partial \eta} - u_g \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) ; \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{1}{Ja} \left(u_g \frac{\partial y}{\partial \xi} - v_g \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) ; \quad \frac{\partial \tau}{\partial t} = 1$$

sendo u_g e v_g os componentes cartesianos da velocidade da malha

$$u_g = \frac{\partial x}{\partial \tau} \quad \text{e} \quad v_g = \frac{\partial y}{\partial \tau} \quad (3.50)$$

A função $\phi(x, y, t)$ pode ser escrita no novo sistema de coordenadas da seguinte maneira:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{1}{Ja} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{1}{Ja} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} - \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{Ja} \left[\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \left(v_g \frac{\partial x}{\partial \eta} - u_g \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \left(u_g \frac{\partial y}{\partial \xi} - v_g \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \right] + \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \quad (3.53)$$

O vetor velocidade no sistema curvilíneo pode ser escrito em função dos componentes contravariantes, os quais são normais as linhas coordenadas constantes. Os componentes contravariantes U e V , nas direções ξ e η , respectivamente, relacionam-se com os componentes cartesianos u e v , nas direções x e y , de acordo com:

$$U = \frac{1}{h_\eta} \left(u \frac{\partial y}{\partial \eta} - v \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \quad ; \quad V = \frac{1}{h_\xi} \left(-u \frac{\partial y}{\partial \xi} + v \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \quad (3.54)$$

onde h_ξ e h_η são métricas resultantes da mudança do sistema de coordenadas e são dadas por

$$h_\xi = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 \right]^{1/2} \quad ; \quad h_\eta = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (3.55)$$

A relação inversa entre os componentes cartesianos e contravariantes é

$$u = \frac{1}{Ja} \left(U h_\eta \frac{\partial x}{\partial \xi} + V h_\xi \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \quad ; \quad v = \frac{1}{Ja} \left(U h_\eta \frac{\partial y}{\partial \xi} + V h_\xi \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \quad (3.56)$$

Utilizando as transformações de coordenadas dadas pelas Eqs. (3.51) a (3.53), pode-se escrever as equações de conservação bi-dimensionais no sistema de coordenadas (ξ, η, τ) .

3.5.1. Equação de conservação de massa

A equação de conservação de massa no sistema de coordenadas adotado é apresentada a seguir:

$$\frac{\partial (Ja \rho_m)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho_m h_\eta \tilde{U}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho_m h_\xi \tilde{V}) = 0 \quad (3.57)$$

onde ρ_m é a massa específica da mistura, h_ξ e h_η são métricas, Ja é o Jacobiano e \tilde{U} e \tilde{V} representam os componentes contra-variantes da velocidade relativa nas direções ξ e η , respectivamente e, são dados por:

$$\tilde{U} = U - U_g \quad ; \quad \tilde{V} = V - V_g \quad (3.58)$$

onde U e V são os componentes contra-variantes da velocidade absoluta, e U_g e V_g são os componentes contra-variantes da velocidade da malha, dados por:

$$U_g = \frac{1}{h_\eta} \left(u_g \frac{\partial y}{\partial \eta} - v_g \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \quad ; \quad V_g = \frac{1}{h_\xi} \left(-u_g \frac{\partial y}{\partial \xi} + v_g \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \quad (3.59)$$

sendo u_g e v_g os componentes cartesianos da velocidade da malha.

3.5.2.

Equação de conservação da quantidade de movimento linear

A seguir são apresentados os componentes cartesianos da equação de conservação de quantidade de movimento linear. As equações são válidas para os dois regimes de escoamento, laminar e turbulento. Para o caso turbulento as velocidades são velocidades médias temporais e no caso laminar a viscosidade turbulenta é nula.

- Componente na direção x

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(Ja \rho_m u)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\eta \tilde{U} u - (\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\xi \tilde{V} u - (\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] = \\
 & = -\frac{1}{h_\eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial \hat{p}}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial \hat{p}}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

- Componente na direção y

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(Ja \rho_m v)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\xi \tilde{U} v - (\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\eta \tilde{V} v - (\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right] = \\
 & = -\frac{1}{h_\xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial \hat{p}}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial \hat{p}}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

onde \hat{p} é uma pressão modificada dada por:

$$\hat{p} = p + \frac{2}{3} \rho_m \kappa \quad (3.62)$$

α_ξ e α_η e β_ξ e β_η representam as áreas nas direções ξ e η dos fluxos difusivos principal e secundário, respectivamente.

$$\alpha_\xi = \frac{h_\eta^2 h_\xi}{Ja} \quad \text{e} \quad \beta_\xi = \alpha_\xi (\vec{e}_\xi \cdot \vec{e}_\eta) \quad (3.63)$$

$$\alpha_\eta = \frac{h_\xi^2 h_\eta}{Ja} \quad \text{e} \quad \beta_\eta = \alpha_\eta (\vec{e}_\xi \cdot \vec{e}_\eta) \quad (3.64)$$

\vec{e}_ξ e \vec{e}_η são os vetores unitários tangentes às curvas ξ e η , respectivamente,, logo,

$$(\vec{e}_\xi \cdot \vec{e}_\eta) = \frac{1}{h_\eta h_\xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \quad (3.65)$$

Vale mencionar que quando a malha é ortogonal, o produto escalar entre os unitários é nulo, logo β_ξ e β_η também são nulos.

3.5.3. Equação de conservação de energia.

A seguir as equações de conservação para a região líquida e sólida são apresentadas. Na região sólida o fluxo convectivo é nulo, pois não existe movimento no sólido, porém é necessário levar em conta o “fluxo convectivo” proveniente do deslocamento das coordenadas.

- Equação de conservação da energia para a região líquida

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (Ja \rho_m T)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\xi \tilde{U} T - \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\eta \tilde{V} T - \left(\frac{\mu}{\text{Pr}} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial T}{\partial \eta} - \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.66)$$

onde T é a temperatura da mistura, μ e μ_t são as viscosidades absoluta e turbulenta e Pr e σ_t são os número de Prandtl e Prandtl turbulento.

• Equação de conservação da energia para a região sólida

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(Ja \rho_s T_s)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[-\rho_s h_\xi U_g T_s - \frac{k_s}{c_{ps}} \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial T_s}{\partial \xi} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial T_s}{\partial \eta} \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[-\rho_s h_\eta V_g T_s - \frac{k_s}{c_{ps}} \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial T_s}{\partial \eta} - \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial T_s}{\partial \xi} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.67)$$

onde T_s é a temperatura do sólido, ρ_s é a massa específica da parafina sólida, k_s é a condutividade térmica e c_{ps} é o calor específico a pressão constante do sólido.

3.5.4. Equação da concentração da mistura óleo/parafina

Apresenta-se a equação de concentração volumétrica de óleo/parafina, neste caso a parafina encontra-se suspensa na solução.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(Ja \rho_m \omega_m)}{\partial \tau} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\xi \tilde{U} \omega_m - \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{\sigma_{sc}} \right) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial \omega_m}{\partial \xi} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial \omega_m}{\partial \eta} \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\eta \tilde{V} \omega_m - \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{\sigma_{sc}} \right) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial \omega_m}{\partial \eta} - \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial \omega_m}{\partial \xi} \right) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.68)$$

3.5.5. Equação da concentração da parafina sólida fora da solução

Apresenta-se a equação de concentração volumétrica de óleo/parafina, neste caso a parafina encontra-se fora da solução.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(Ja \rho_m \omega_p)}{\partial \tau} + \\ & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\xi \tilde{U} \omega_p - \left(\frac{\mu}{Sc_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_{sc}} \right) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial \omega_p}{\partial \xi} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial \omega_p}{\partial \eta} \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\eta \tilde{V} \omega_p - \left(\frac{\mu}{Sc_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_{sc}} \right) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial \omega_p}{\partial \eta} - \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial \omega_p}{\partial \xi} \right) \right] = S_{op} \end{aligned} \quad (3.69)$$

3.5.6.**Equação de conservação do modelo κ - ε**

No caso do regime turbulento, a equação para a energia cinética turbulenta é

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(Ja \rho_m \kappa)}{\partial \tau} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\xi \tilde{U} \kappa - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial \kappa}{\partial \xi} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial \kappa}{\partial \eta} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\eta \tilde{V} \kappa - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial \kappa}{\partial \eta} - \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial \kappa}{\partial \xi} \right) \right] = \\
 & = Ja(P_\kappa - \rho_m \varepsilon)
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

onde P_κ é o termo de produção de κ ,

$$\begin{aligned}
 P_\kappa = & 2 \mu_t \left[\frac{1}{h_\eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right]^2 + \\
 & + 2 \mu_t \left[\frac{1}{h_\xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right]^2 + \\
 & + \mu_t \left[\frac{1}{h_\xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial v}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{h_\eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial v}{\partial \xi} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right]^2
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

e a equação para a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta é

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial(Ja \rho_m \varepsilon)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\rho_m h_\xi \tilde{U} \varepsilon - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(\frac{\alpha_\xi}{h_\xi} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \xi} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta} \right) \right] + \\
 & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\rho_m h_\eta \tilde{V} \varepsilon - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(\frac{\alpha_\eta}{h_\eta} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \eta} - \frac{\beta_\eta}{h_\xi} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \xi} \right) \right] = \\
 & = \frac{\varepsilon}{\kappa} (c_{1\varepsilon} f_1 P_\kappa - c_{2\varepsilon} f_2 \rho_m \varepsilon) Ja
 \end{aligned} \tag{3.72}$$

3.6.**Condições Iniciais e de Contorno**

A condição inicial do problema é obtida após atingir o regime permanente, com a temperatura do fluido e das paredes constantes acima da TIAC, não

existindo deposição de parafina. A posição inicial da interface é coincidente com as paredes do canal, isto é:

$$\delta(x, t = 0) = 0 \quad ; \quad 0 \leq x \leq L \quad (3.73)$$

Na entrada do domínio todas as propriedades são uniformes. A temperatura é igual a $T_{in}=40^{\circ}\text{C}$, a concentração da parafina dissolvida é $\omega_m = 0,1$. Na entrada, não existe partícula sólida fora de suspensão, logo $\omega_p = 0$. A velocidade é uniforme e igual a u_{in} , tal que o número de Reynolds seja

$$\text{Re}_{in} = \frac{\rho_m u_{in} a}{\mu} \quad (3.74)$$

A energia cinética turbulenta na entrada e a sua taxa de dissipação são uniformes e iguais a:

$$\kappa_{in} = \frac{3}{2} (I u_{in})^2 \quad ; \quad \varepsilon_{in} = C_{\mu} \frac{\kappa_{in}^2}{0,5a} \quad (3.75)$$

onde I é a intensidade turbulenta, $I = 0,16 (\text{Re}_{in})^{-1/8}$, Re_{in} é o número de Reynolds na entrada do canal.

A concentração da parafina dissolvida na interface, ω_{int} , é determinada a partir da curva de saturação, Fig. 3.3, se a temperatura da interface T_{int} for inferior a TIAC. Caso contrário, a parede é considerada impermeável, i.e., fluxo de massa nulo:

$$\begin{aligned} \text{se } T_{int} < \text{TIAC} &\Rightarrow \omega_{int} = 1,021 \times 10^{-9} \times T_{int}^{5,133} \\ \text{se } T_{int} > \text{TIAC} &\Rightarrow \left. \frac{\partial \omega_m}{\partial n} \right|_{int} = 0 \end{aligned} \quad (3.76)$$

Em todas as superfícies sólidas (paredes e interface) a condição hidrodinâmica é de não deslizamento. As condições de contorno para as variáveis turbulentas, foram definidas de acordo com o modelo de Bremhorst *et al* (1981), sendo a energia cinética turbulenta nula e a taxa de dissipação da energia cinética turbulenta igual a derivada segunda da energia cinética turbulenta κ na direção normal a interface,

$$\varepsilon = \frac{\mu}{\rho_m} \frac{\partial^2 \kappa}{\partial n^2} \quad (3.77)$$

$$\frac{\partial^2 \kappa}{\partial n^2} = \left(\frac{h_\xi}{Ja} \right)^2 \frac{\partial^2 \kappa}{\partial \eta^2} - \frac{\beta_\xi}{Ja \cdot h_\eta} \left(\frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \kappa}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \kappa}{\partial \eta} \right) + \left(\frac{\beta_\xi}{h_\eta h_\xi} \right)^2 \frac{\partial^2 \kappa}{\partial \xi^2} \quad (3.78)$$

A condição de contorno para interface líquido sólido para a equação de concentração de parafinas precipitada fora da solução é de concentração nula porque todas as partículas sólidas de parafina que chegam à interface passam a formar parte do depósito sólido de parafinas.

Na saída, despreza a difusão axial de todas as grandezas. Na simetria considera-se o fluxo normal de todas as grandezas nulo, assim como o componente de velocidade normal a linha de simetria.

Com relação a condição de contorno térmica para a parede externa de cobre é de temperatura constante e igual a $T_{cobre}=15^\circ\text{C}$. Já na região do acrílico, considerou-se a parede isolada.

A espessura do depósito é determinada pela Eq. (3.6), quando $T < T_{IAC}$. O gradiente da concentração na direção normal à interface, pode ser obtido por

$$\frac{\partial \omega_m}{\partial n} = \text{grad } \omega_m \cdot \vec{n}_\eta \quad (3.79)$$

onde \vec{n}_η é o unitário normal à uma superfície η constante. A Eq. (3.6) rescrita em função das coordenada ξ e η é

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta}{\partial t} = & \frac{-D_m}{(1-\phi^*)} \frac{\rho_m}{\rho_s} \left(\frac{h_\xi}{Ja} \frac{\partial \omega_m}{\partial \eta} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta h_\xi} \frac{\partial \omega_m}{\partial \xi} \right)_{\text{int}} + \\ & + \frac{-D_b}{(1-\phi^*)} \frac{\rho_s}{\rho_s} \left(\frac{h_\xi}{Ja} \frac{\partial \omega_p}{\partial \eta} - \frac{\beta_\xi}{h_\eta h_\xi} \frac{\partial \omega_p}{\partial \xi} \right)_{\text{int}} \end{aligned} \quad (3.80)$$