4 Método Numérico

Para resolver as equações de conservação correspondentes ao Modelo de Dois Fluidos apresentado no Capítulo 3, utilizou-se o método de Volumes Finitos (Patankar, 1980), o qual consiste em dividir o domínio computacional em volumes de controle e integrar temporalmente e espacialmente cada equação de transporte em cada volume de controle, estabelecendo uma equação discreta que expresse a lei de conservação em cada um deles.

O código utilizado na presente dissertação foi desenvolvido pelo grupo de Dinâmica dos Fluidos Computacional do Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio (Ortega, 2004 e Carneiro, 2006) e vem sendo continuamente aprimorado. A metodologia empregada é baseada nos trabalhos de Issa e Kempf, (2003) e Bonizzi (2003). Os programas desenvolvidos foram criados em linguagem Fortran.

De acordo com recomendação de Patankar (1980), utilizou-se malha deslocada para as velocidades em relação às outras grandezas escalares (frações volumétricas, massas específicas e pressão), como ilustrado na Fig. 4.1.







Figura 4.1 – Volumes de controle. (a) fração volumétrica e pressão (b) velocidades.

Os símbolos maiúsculos P, $W \in E$ referem-se aos pontos nodais principais e seus vizinhos oeste (West) e leste (East), respectivamente, e correspondem aos centros dos volumes de controle principais e as faces dos volumes de controle vetoriais (Fig. 4.1a). Os símbolos minúsculos w, ww, $e \in ee$, referem-se às faces dos volumes de controle escalares e seus vizinhos da esquerda e direita, respectivamente, sendo também os centros dos volumes de controle das velocidades (Fig. 4.1b). A vantagem mais importante desta abordagem é evitar a obtenção de campos de pressões oscilatórios irrealistas, satisfazendo as equações discretizadas de conservação.

O programa foi desenvolvido baseado no uso de uma malha uniformente espaçada igual a Δx .

A discretização temporal envolve a integração de cada termo das equações diferenciais num intervalo de tempo Δt . Utilizou-se o método totalmente implícito ou Euler implícito (Patankar, 1980). Já para a discretização espacial do fluxo convectivo selecionou-se o esquema *Upwind* (Patankar, 1980). Estes esquemas foram selecionados por serem incondicionalmente estáveis, independentemente dos tamanhos empregados para o passo de tempo e malha. O algoritmo para resolver o acoplamento velocidade pressão é baseado no método PRIME (*Pressure Implicit Momentum Explicit*).

A seguir uma breve descrição das equações discretizadas é apresentada.

4.1 Fração Volumétrica

A fração volumétrica do gás é obtida a partir da solução da equação de conservação de massa da fase gasosa (Eq. 3.4). A equação discretizada para a fração volumétrica do gás, para o volume de controle principal ($d \forall = A \Delta x$) ilustrado na Fig. 4.1a é:

$$a_P^{\alpha} \alpha_{G,P} = a_E^{\alpha} \alpha_{G,E} + a_W^{\alpha} \alpha_{G,W} + b^{\alpha}$$

$$\tag{4.1}$$

onde os coeficientes $a_P^{\alpha}, a_E^{\alpha}, a_W^{\alpha}$ e b^{α} são dados pelas seguintes expressões:

$$a_W^{\alpha} = \left\| \tilde{F}_w, 0 \right\| \qquad ; \qquad a_E^{\alpha} = \left\| -\tilde{F}_e, 0 \right\|$$

$$(4.2)$$

$$b^{\alpha} = a_P^o \,\alpha_{G,P}^o \qquad ; \qquad a_P^o = \rho_{G,P}^o \,\frac{A\,\Delta x}{\Delta t} \tag{4.3}$$

$$a_P^{\alpha} = \rho_{G,P} \frac{A \Delta x}{\Delta t} + \| \tilde{F}_e, 0 \| + \| - \tilde{F}_w, 0 \|$$

$$(4.4)$$

sendo $\rho^o_{G,P}$ e $\alpha^o_{G,P}$ referentes ao instante de tempo anterior. \tilde{F} é um pseudo

fluxo de massa, definido baseado na massa específica da face estimada com a aproximação *Upwind*, de acordo com

$$\tilde{F}_{w} = \rho_{G,W} A \| U_{G,w}, 0 \| - \rho_{G,P} A \| - U_{G,w}, 0 \|$$
(4.5)

$$\tilde{F}_{e} = \rho_{G,P} A \| U_{G,e}, 0 \| - \rho_{G,E} A \| - U_{G,e}, 0 \|$$
(4.6)

O símbolo ||a, b|| representa o máximo entre $a \in b$.

Nas Eqs. (4.2) a (4.4), nota-se que todos os coeficientes são sempre positivos, o que garante que a fração volumétrica do gás seja sempre maior ou igual a zero, conforme desejado.

A fração volumétrica da fase líquida pode ser diretamente determinada através da relação dada pela Eq.(3.13):

$$\alpha_{L,P} = 1 - \alpha_{G,P} \tag{4.7}$$

4.2 Velocidades

O procedimento de discretização das equações de quantidade de movimento linear para a determinação das velocidades das fases líquida e gasosa é análogo ao utilizado na equação para a fração volumétrica. No entanto, deve-se ter em vista que a integração se dá no volume de controle deslocado (Fig. 4.1b).

Na equação discretizada, a pressão é considerada explicitamente, uma vez que também é uma incógnita. Adicionalmente, aplicou-se um fator de subrelaxação γ devido ao fato das equações serem fortemente não-lineares. Assim, o sistema resultante de equações algébricas para a determinação das velocidades de cada uma das fases *K* possui a seguinte forma:

$$\frac{a_{w_{K}}}{\gamma}U_{K,w} = a_{ww_{K}}U_{K,ww} + a_{e_{K}}U_{K,e} + b^{K} + (1-\gamma)\frac{a_{w_{K}}}{\gamma}U_{K,w}^{*} - \alpha_{K,w} A (P_{P} - P_{W})$$
(4.8)

Na Eq. (4.8), a variável $U_{K,w}^*$ refere-se à velocidade da fase K na iteração anterior. Os coeficientes são determinados através das seguintes expressões:

$$a_{ww_{K}} = \|F_{W}, 0\| ; a_{e_{K}} = \|-F_{P}, 0\| ; a_{w_{K}}^{o} = \tilde{\rho}_{K,w}^{o} \tilde{\alpha}_{K,w}^{o} A \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

$$a_{w_{K}} = a_{ww_{K}} + a_{e_{K}}^{o} + a_{w_{K}}^{F} \Delta x ; b = a_{w_{K}}^{o} U_{K,w}^{o} + S_{C}^{K} \Delta x$$
(4.9)

Os fluxos de massa F sao definidos como

$$F = \rho \ \alpha U A \tag{4.10}$$

 F_W e F_P devem ser avaliados de forma a garantir a conservação de massa para o volume deslocado, sendo definidos de acordo com:

$$F_P = (F_w + F_e)/2$$
; $F_W = (F_{ww} + F_w)/2$ (4.11)

sendo os fluxos de massa nas faces do volume de controle principal iguais a:

$$F_w = \tilde{\rho}_{K,w} \,\tilde{\alpha}_{K,w} \,U_{K,w} \,A \tag{4.12}$$

Para avaliar a massa específica e fração volmétrica nas faces do volume de controle, $\tilde{\rho}_{K,w} \in \tilde{\alpha}_{K,w}$, uma média aritmética entre os valores dos pontos nodais *P* e *W* é realizada.

$$\tilde{\rho}_{K,w} = (\rho_{K,P} + \rho_{K,W})/2$$
; $\tilde{\alpha}_{K,w} = (\alpha_{K,P} + \alpha_{K,W})/2$ (4.13)

As expressões para F_{ww} e F_e são análogas à Eq. (4.12).

Os termos S_C^K e S_P^K da Eq. (4.9) correspondem aos termos de fonte das equações de conservação de quantidade de movimento linear

$$S_C^K = b_{gr,K} + b_{h,K} + b_{int,K} U_{K',w}$$
; $S_P^K = b_{wall,K} + b_{int,K}$ (4.14)

onde K' corresponde a outra fase diferente de K. As fontes devido aos efeitos gravitacionais e de coluna hidrostática do filme líquido h são

$$b_{gr,K} = -\tilde{\rho}_{K,w} \ \tilde{\alpha}_{K,w} \ g \ A \, \mathrm{sen} \, \beta \tag{4.15}$$

$$b_{h,K} = -\tilde{\rho}_{K,w} \,\tilde{\alpha}_{K,w} \,g \,A \cos\beta \,\frac{h_{L,P} - h_{L,W}}{\Delta x} \tag{4.16}$$

A altura de líquido h_L é obtida através da resolução pelo método das secantes (Press, 1992) da Eq. 3.14.

As fontes associadas ao atrito entre as fases e entre cada fase e a parede são

$$b_{\rm int} = \frac{1}{2} f_{i,w} \, \tilde{\rho}_{G,w} \, S_{\rm int,w} \left| U_{G,w} - U_{L,w} \right| \tag{4.17}$$

$$b_{wall,K} = \frac{1}{2} f_{K,w} \,\tilde{\rho}_{K,w} \,S_{K,w} \left| U_{K,w} \right| \tag{4.18}$$

Nas equações acima, S_K corresponde ao perímetro molhados da fase K e S_{int} .é o perímetro da interface. Os fatores de atrito são obtidos através das relações apresentadas na Tabela 3.1, utilizando-se as relações geométricas apropriadas.

Para facilitar a obtenção da transição do regime laminar para turbulento, minimizando instabilidades numéricas, considerou-se regime laminar para números de Reynolds menores que 2000 e regime turbulento para números de Reynolds maiores que 2200. Entre estes dois valores, utilizou-se variação linear do fator de atrito.

4.3 Pressão

A equação para a pressão é derivada para o volume de controle principal, a partir da equação de conservação de massa da mistura. Esta equação é obtida pela combinação das equações de continuidade de líquido e gás, as quais são ponderadas pelas massas especificas de referência das respectivas fases. Esta normalização é realizada de modo a evitar que a equação do líquido predomine sobre a do gás, o que pode levar a sérios problemas de convergência (Issa e Kempf, 2003; Bonizzi, 2003).

A integração é realizada de maneira análoga à integração da equação para a determinação da fração volumétrica da fase gasosa, resultando em:

$$\begin{bmatrix}
\left(\frac{\rho_{G,P}}{\rho_{G}^{ref}}\alpha_{G,P} - \frac{\rho_{G,P}^{o}}{\rho_{G}^{ref}}\alpha_{G,P}^{o}\right) + (\alpha_{L,P} - \alpha_{L,P}^{o}) \end{bmatrix} \frac{A\,\Delta x}{\Delta t} + \\
\left(\frac{\hat{\rho}_{G,e}}{\rho_{G}^{ref}}\hat{\alpha}_{G,e}U_{G,e} - \frac{\hat{\rho}_{G,w}}{\rho_{G}^{ref}}\hat{\alpha}_{G,w}U_{G,w}\right) A + (\hat{\alpha}_{L,e}U_{L,e} - \hat{\alpha}_{L,w}U_{L,w}) A = 0$$
(4.19)

Na Eq. (4.19), a fração volumétrica da fase gasosa, assim com a massa específica do gás nas faces do volume de controle são avaliadas baseadas na aproximação *Upwind*, de forma coerente com o procedimento utilizado na equação de conservação de massa da fase gasosa,

$$\hat{\alpha}_{G,w} = \left\| \operatorname{sinal}(U_{G,w}), 0 \right\| \alpha_{G,W} - \left\| -\operatorname{sinal}(U_{G,w}), 0 \right\| \alpha_{G,P}$$
(4.20)

$$\hat{\rho}_{G,w} = \|\operatorname{sinal}(U_{G,w}), 0\| \rho_{G,W} - \|\operatorname{-sinal}(U_{G,w}), 0\| \rho_{G,P}$$
(4.21)

A fração volumétrica do líquido dada por

$$\hat{\alpha}_{L,w} = 1 - \hat{\alpha}_{G,w} \tag{4.22}$$

A dependência com a pressão é introduzida através das velocidades das fases, derivadas das respectivas equações discretizadas de quantidade de movimento linear. Considerando que a velocidade da face oeste corresponde ao nó i, a velocidade correspondente a face leste, deve ser obtida a partir da equação discretizada de quantidade de movimento referente ao nó i+1. As velocidades nas faces dos volumes de controle podem ser reescritas da seguinte forma:

$$U_{K,w_i} = \hat{U}_{K,w} - \frac{\tilde{\alpha}_{K,w}A}{a_{w_{K_i}}/\gamma} (P_P - P_W)$$
(4.23)

$$U_{K,e_{i}} = U_{K,w_{i+1}} = \hat{U}_{K,e} - \frac{\tilde{\alpha}_{K,e}A}{a_{w_{K,i+1}}/\gamma} (P_{E} - P_{P})$$
(4.24)

com:

$$\hat{U}_{K,w} = \frac{a_{ww_{k,i}} U_{K,ww_{i}} + a_{e_{k,i}} U_{K,e_{i}} + b_{i}^{K} + (1 - \gamma)(a_{w_{k,i}} / \gamma) U_{K,w_{i}}^{*}}{a_{w_{k,i}} / \gamma}$$
(4.25)

$$\hat{U}_{K,e} = \frac{a_{ww_{k,i+1}} U_{K,ww_{i+1}} + a_{e_{k,i+1}} U_{K,e_{i+1}} + b_{i+1}^{K} + (1-\gamma)(a_{w_{k,i+1}}/\gamma) U_{K,w_{i+1}}^{*}}{a_{w_{k,i+1}}/\gamma}$$

Método Numérico _____

A massa específica do gás no ponto nodal depende da pressão através da equação dos gases ideais:

$$\rho_{G,P} = \frac{P_P}{RT} = \frac{P_P}{P_{ref}} \rho_G^{ref}$$
(4.27)

Substituindo as Eqs. (4.20) a (4.27) em (4.19) e rearrumando, obtém-se a seguinte equação discretizada para determinar a pressão:

$$a_P^P P_P = a_W^P P_W + a_E^P P_E + b^P \tag{4.28}$$

onde os coeficientes são dados pelas seguintes expressões:

$$a_W^P = \left(\frac{\hat{\rho}_{G,w}}{\rho_G^{ref}}\hat{\alpha}_{G,w} A \frac{\tilde{\alpha}_{G,w} A}{a_{w,G_i}/\gamma} + \hat{\alpha}_{L,w} A \frac{\tilde{\alpha}_{L,w} A}{a_{w,L_i}/\gamma}\right)$$
(4.29)

$$a_E^P = \left(\frac{\rho_{G,e}}{\rho_G^{ref}} \,\hat{\alpha}_{G,e} \, A \frac{\tilde{\alpha}_{G,e} \, A}{a_{w,G_{i+1}} / \gamma} + \hat{\alpha}_{L,e} \, A \frac{\tilde{\alpha}_{L,e} \, A}{a_{w,L_{i+1}} / \gamma}\right) \tag{4.30}$$

$$a_P^P = a_W^P + a_E^P + \frac{\alpha_{G,P}}{P_{ref}} \frac{A \,\Delta x}{\Delta t} \tag{4.31}$$

$$b^{P} = \left(\frac{\hat{\rho}_{G,w}}{\rho_{G}^{ref}}\hat{\alpha}_{G,w} \land \hat{U}_{G,w} + \hat{\alpha}_{L,w} \land \hat{U}_{L,w}\right) - \left(\frac{\rho_{G,e}}{\rho_{G}^{ref}}\hat{\alpha}_{G,e} \land \hat{U}_{G,e} + \hat{\alpha}_{L,e} \land \hat{U}_{L,e}\right) + \left(\frac{P_{P}^{o} \alpha_{G,P}^{o}}{P_{ref}} - \left(\alpha_{L,P} - \alpha_{L,P}^{o}\right)\right) \frac{\Lambda \Delta x}{\Delta t}$$

$$(4.32)$$

4.4 Condições de Contorno

Na entrada do domínio (Fig. 4.2a) são conhecidas a fração volumétrica do gás (α_G^{inlet}) e as velocidades superficiais do líquido (U_{sL}^{inlet}) e do gás (U_{sG}^{inlet}). De acordo com as Eqs. (3.11) e (3.13), a fração volumétrica do líquido

assim como as velocidades das fases podem ser diretamente calculadas. Para determinar a pressão, a equação de conservação de massa da mistura normalizada é resolvida para o meio volume de controle da entrada, impondo-se os valores conhecidos das vazões de gás e líquido na entrada. A massa específica na entrada pode ser determinada através da equação de estado, Eq. (3.12).

Na saída do domínio (Fig.4.2b), a pressão é especificada. Neste caso, equações adicionais para a fração volumétrica e para ambas as velocidades devem ser derivadas. Para determinar estas variáveis, uma extrapolação linear utilizando-se os dois primeiros vizinhos internos é realizada.



Figura 4.2 – Volume de controle da fronteira do domínio: (a) na entrada (b) saída.

4.5 Malha Computacional e Passo de Tempo

A definição do espaçamento da malha Δx utilizado no processo de discretização deve ser realizada de forma a fornecer resultados com a precisão desejada. O esquema *Upwind* de interpolação utilizado aqui introduz uma alta difusão numérica ao sistema, sendo necessárias, portanto, malhas consideravelmente refinadas para atingir a acurácia desejada. Testes de malha devem ser realizados de forma a garantir independência da solução na malha, o que só é conseguido se o sistema de equações for bem posto.

O passo de tempo Δt está intimamente ligado ao espaçamento da malha pela Condição de Courant–Friedrichs–Lewy (ou simplesmente número de Courant). O número de Courant *C* estabelece um Δt máximo para um determinado Δx de modo a se garantir a convergência do sistema algébrico governante.

$$C = \frac{\max(|U_w|)\Delta t}{\Delta x}$$
(4.34)

Assim, o passo de tempo fica limitado a:

$$\Delta t \le C \,\Delta x / \max(|U_w|) \tag{4.35}$$

O número de Courant igual a 1 implica que o passo de tempo deve ser determinado de modo que uma partícula de fluido viaje no máximo um volume de controle por passo de tempo. No presente trabalho, visando à obtenção de alta precisão espacial, especificou-se um número de Courant entre 0,05 e 0,2.

Como mencionado, deve-se definir a malha de tal forma que a solução independa do tamanho da mesma. Quando uma malha é muito refinada (pequenos volumes de controle), o passo de tempo também deverá muito pequeno e conseqüentemente o esforço computacional será muito grande.

4.6 Critério de Convergência

Uma vez que o sistema de equações é não linear, o mesmo precisa ser resolvido de forma iterativa. Em cada passo de tempo, a solução é considerada convergida quando o máximo resíduo de todas as equações for inferior a uma tolerância (*tol*) especificada. Assim,

$$\operatorname{Res}_{\max} \le tol \tag{4.36}$$

O resíduo máximo de cada equação é obtido de acordo com a seguinte expressão:

$$\operatorname{Res}_{\max} = \max \left| a_P^{\phi} \, \phi_P^* - \left(a_W^{\phi} \, \phi_W^* + a_E^{\phi} \, \phi_E^* + b^{\phi} \right) \right|$$
(4.37)

onde ϕ^* é a grandeza calculada na iteração anterior, e $a_P^{\phi}, a_W^{\phi}, a_E^{\phi} e b^{\phi}$ são os coeficientes de ϕ calculados na iteração atual. No presente trabalho, foi utilizada uma tolerância igual a, $tol = 10^{-5}$.

4.7 Procedimento de Solução

Devido ao alto tempo de processamento para obter a solução com a precisão desejada, investigou-se o desempenho da metodologia utilizando dois procedimentos de solução do sistema algébrico. O primeiro envolve a solução do sistema de equações de forma seqüencial (Ortega, 2004). Neste caso cada equação de conservação é resolvida pelo algoritmo TDMA (*Tri Diagonal Matrix Algorithm*) ou algoritmo de Thomas (Patankar, 1980). O segundo procedimento adaptado no presente trabalho do algoritmo desenvolvido por (Winicki, 2007), tem por objetivo aumentar o acoplamento entre as equações, diminuindo o número de iterações por passo de tempo. Neste caso, o conjunto de equações é resolvido simultaneamente pelo algoritmo TDMA por blocos.

4.7.1 Procedimento Seqüencial

O procedimento de solução do sistema algébrico seqüencial consiste dos seguintes passos:

- a) Estimativa inicial de velocidades, frações volumétricas e pressão
- b) Cálculo da massa específica do gás
- c) Cálculo do nível de líquido
- d) Cálculo dos parâmetros geométricos
- e) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de quantidade de movimento linear do líquido e solução do sistema algébrico, obtenção de U_L
- f) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de quantidade de movimento linear do gás e solução do sistema algébrico, obtenção de U_G
- g) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de massa da mistura e solução do sistema algébrico, obtenção de p
- h) Correção das velocidades das fases
- i) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de massa do gás e solução do sistema algébrico, obtenção de α_G
- j) Cálculo de α_L
- k) Incrementar o passo de tempo se todos os resíduos são inferiores a tolerância desejada, caso contrário realizar nova iteração até convergir

4.7.2 Procedimento em Bloco

O procedimento de solução do sistema algébrico em blocos consiste dos seguintes passos:

- a) Estimativa inicial de velocidades, frações volumétricas e pressão
- b) Cálculo da massa específica do gás
- c) Cálculo do nível de líquido
- d) Cálculo dos parâmetros geométricos
- e) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de quantidade de movimento linear do líquido
- f) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de quantidade de movimento linear do gás
- g) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de massa da mistura
- h) Cálculo dos coeficientes da equação de conservação de massa do gás
- i) Solução do sistema algébrico em blocos com a determinação simultânea de U_L , U_G , $p \in \alpha_G$
- j) Cálculo de α_L
- k) Incrementar o passo de tempo se todos os resíduos são inferiores a tolerância desejada, caso contrário realizar nova iteração até convergir

4.7.3 Algoritmo TDMA

O algoritmo TDMA (*Tri Diagonal Matrix Algorithm*) ou algoritmo de Thomas (Patankar, 1980), que é um método direto de solução sistemas tridiagonais.

A aplicação deste algoritmo pode ser resumida na seguinte seqüência:

1. Determinação dos valores $P_1 \in Q_1$:

$$P_{1} = \frac{a_{E_{1}}}{a_{P_{1}}} \qquad e \qquad Q_{1} = \frac{b_{1}}{a_{P_{1}}} \tag{4.38}$$

2. Cálculo dos valores de P_i e Q_i para i=2 até i=N:

$$P_{i} = \frac{a_{E_{i}}}{a_{P_{i}} - a_{W_{i}}P_{i-1}} \qquad e \qquad Q_{i} = \frac{b_{i} + a_{W_{i}}Q_{i-1}}{a_{P_{i}} - a_{W_{i}}P_{i-1}}$$
(4.39)

- 3. Fazer: $\varphi_N = Q_N$
- 4. Calcular a solução numérica do sistema algébrico φ_i para i = N-1 até i=1:

$$\varphi_i = P_i \varphi_{i+1} + Q_i \tag{4.40}$$

Dessa forma, todos os valores de φ_i são obtidos por substituição regressiva.

4.7.4 Algoritmo TDMA em Blocos

Neste caso, o sistema de equações é representado na forma matricial por

$$A_{i}\Phi_{i} = B_{i}\Phi_{i+1} + C_{i}\Phi_{i-1} + D_{i}$$
(4.41)

onde a grandeza Φ_i é um vetor, que envolve as quatro incógnitas

$$\Phi_{i} = \begin{bmatrix} \alpha_{G,i} \\ U_{G,i} \\ U_{L,i} \\ P_{i} \end{bmatrix}$$
(4.42)

A Equação (4.41) é escrita para cada nó *i*, onde os coeficientes A_i , B_i , C_i , são matrizes e D_i é um vetor, definidos por

$$[A_{i}] = \begin{bmatrix} a_{p}^{\alpha_{G}} & 0 & 0 & 0 \\ a_{p}^{U_{G},\alpha_{G}} & a_{p}^{U_{G}} & a_{p}^{U_{G},U_{L}} & a_{p}^{U_{G},P} \\ a_{p}^{U_{L},\alpha_{G}} & a_{p}^{U_{L},U_{G}} & a_{p}^{U_{L}} & a_{p}^{U_{L},P} \\ 0 & 0 & 0 & a_{p}^{P} \end{bmatrix}; \ [D_{i}] = \begin{bmatrix} b^{\alpha_{G}} \\ bb^{U_{G}} \\ bb^{U_{G}} \\ bb^{U_{L}} \\ b^{P} \end{bmatrix}$$
(4.43)

$$[\mathbf{B}_{i}] = \begin{bmatrix} a_{E}^{\alpha_{G}} & 0 & 0 & 0\\ 0 & a_{e_{G}} & 0 & 0\\ 0 & 0 & a_{e_{L}} & 0\\ 0 & 0 & 0 & a_{E}^{P} \end{bmatrix}; [\mathbf{C}_{i}] = \begin{bmatrix} a_{W}^{\alpha_{G}} & 0 & 0 & 0\\ u_{G}^{\alpha_{G}} & a_{wW_{G}} & 0 & a_{W}^{U_{G},P}\\ a_{W}^{U_{L},\alpha_{G}} & 0 & a_{wW_{L}} & a_{W}^{U_{L},P}\\ 0 & 0 & 0 & a_{W}^{P} \end{bmatrix}$$
(4.44)

Os novos coeficientes que aparecem nas matrizes A_i e C_i e vetor D_i são introduzidos para aumentar o acoplamento entre as variáveis nas equações de quantidade de movimento linear e são iguais a

$$a_P^{U_G,\alpha_G} = -(b_{gr,G} + b_{h,G})/2 \quad ; \ a_P^{U_L,\alpha_G} = (b_{gr,L} + b_{h,L})/2 \quad (4.45)$$

$$a_P^{U_G, U_L} = -b_{\text{int}} \Delta x$$
 ; $a_P^{U_L, U_G} = -b_{\text{int}} \Delta x$ (4.46)

$$a_P^{U_G,P} = (\tilde{\alpha}_{G,w}A) \qquad ; \qquad a_P^{U_L,P} = (\tilde{\alpha}_{L,w}A) \qquad (4.47)$$

$$a_W^{U_G,\alpha_G} = -a_P^{U_G,\alpha_G} \qquad ; \qquad a_W^{U_L,\alpha_G} = -a_P^{U_L,\alpha_G} \qquad (4.48)$$

$$a_W^{U_G, p} = a_P^{U_G, p}$$
; $a_W^{U_L, p} = a_P^{U_L, p}$ (4.49)

$$bb^{U_G} = a^o_{w_G} U^o_G + (1 - \gamma) \frac{a_{w_G}}{\gamma} U^*_{G,w}$$
(4.50)

$$bb^{U_L} = a^o_{w_L} U^o_L + (1 - \gamma) \frac{a_{w_L}}{\gamma} U^*_{L,w} + (b_{gr,L} + b_{h,L})$$
(4.51)

No método TDMA por blocos, os coeficientes da matriz tridiagonal são as matrizes 4 x 4 apresentadas nas Eqs. (4.43) a (4.45). As operações indicadas na seção 4.7.3 são realizadas para as matrizes, em vez de para cada equação escalar.

4.8 Formação da Golfada

Uma situação crítica da metodologia surge quando existe a formação da golfada, pois a fração volumétrica de gás tende a zero, e a equação de quantidade

de movimento para o gás torna-se singular, uma vez que este parâmetro multiplica ambos os lados da equação, isso torna possível o surgimento de valores anormalmente altos da velocidade do gás à jusante da golfada.

Para a solução desse problema, Issa e Kempf (2003) e Bonizzi (2003) recomendam que o surgimento das golfadas na tubulação seja monitorado através da fração volumétrica do gás nas faces do volume de controle principal, onde as velocidades são resolvidas, avaliada segundo uma média harmônica entre os valores nos pontos nodais $W \in P$, como

$$\tilde{\alpha}_{G,W}^{flag} = \frac{2 \,\alpha_{G,W} \,\alpha_{G,P}}{(\alpha_{G,W} + \alpha_{G,P})} \tag{4.52}$$

Quando $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag} < 0,02$ (conforme recomendações de Issa e Kempf, 2003; Bonizzi, 2003), a velocidade do gás deve ser especificada igual a zero.

Adicionalmente, devem ser suprimidos os termos relativos à velocidade da fase gasosa na equação da pressão, sempre que $U_G = 0$. Entretanto, deve ser ressaltado que a influência dos termos relativos à variação temporal da fração volumétrica de gás no nó principal deve ser mantida, assim como todos os termos relativos à fase líquida.

4.9 Cálculo dos Parâmetros Médios das Golfadas

Para obtenção dos parâmetros médios das golfadas é necessário atingir o regime estatisticamente permanente. Para determinar se este regime foi alcançado, a fração volumétrica é monitorada ao longo do tempo em diferentes coordenadas axiais. Somente após a observação de que este regime foi obtido, as grandezas de interesses são monitoradas e armazenadas para a determinação das médias de interesse.

As propriedades das golfadas como comprimento, velocidade da frente e cauda e a freqüência são medidas numericamente em cinco posições fixas ao longo da tubulação. Para cada posição obteve-se resultados os quais são avaliados em termos das médias destes parâmetros.

A velocidade da frente da golfada é medida medindo-se o intervalo de tempo levado pela frente para percorrer uma determinada distância entre dois pontos pré-definidos ($x_1 e x_2$). O espaçamento entre os pontos foi tomado como 10 vezes o diâmetro. Carneiro (2006) fez uma análise de sensibilidade, variando esta distância para 5D e 15D, e não observou nenhuma diferença. Assim, quando a variável $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag}(x_l) < 0.02$, a frente da golfada atinge a posição x_{l_i} um contador de intervalos de tempo é acionado, a contagem continua até que $\tilde{\alpha}_{G.w}^{flag}(x_2) < 0.02$, quando a frente da golfada atinge a posição x_2 , como mostrado na Fig. 4.3a. Assim, a velocidade da frente pode ser estimada com:

$$U_{t,n} = \frac{x_2 - x_1}{\sum_{1 \to 2} \Delta t_t} \tag{4.53}$$

A velocidade da cauda da golfada é medida de forma análoga, medindo-se o intervalo de tempo levado pela cauda para percorrer a mesma distância ($x_1 e x_2$). Assim, quando a variável $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag}(x_I) > 0,02$, a cauda da golfada atinge a posição x_{I} , e outro contador de intervalos de tempo é acionado, a contagem continua até que $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag}(x_2) > 0,02$, quando a cauda da golfada atinge a posição x_2 , como mostrado na Fig. 4.3b. Assim:



Figura 4.3 - Ilustração da medição da velocidade cada golfada. (a) frente (b) cauda.

(4.54)

Para calcular o comprimento de cada golfada passando pela posição x_2 , a variável $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag}$ é continuamente monitorada, de forma a identificar os instantes em que a frente e a cauda da golfada atingem esta posição. Quando $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag}(x_2) < 0,02$, detecta-se a chegada da frente da golfada. Um novo contador de intervalos de tempo é iniciado, até que $\tilde{\alpha}_{G,w}^{flag}(x_2)$ atinja novamente valores maiores do que 0,02, marcando o momento de chegada da cauda da golfada a x_2 . Com a velocidade de translação anteriormente determinada, Eq. (4.53), e assumindo que a mesma é constante, pode-se calcular o comprimento da golfada passando por x_2 através de:

$$L_{S,n} = U_{t,n} \sum_{f \to c} \Delta t_t \tag{4.55}$$

onde f e c denotam "frente", e "cauda" da golfada, respectivamente.

A freqüência das golfadas (v_s) é definida como o número de golfadas que passa numa determinada posição (x_o) por intervalo de tempo. Este parâmetro é calculado a partir dos valores do *hold-up* de líquido medidos em função do tempo durante todo o intervalo de simulação. Desta forma, cada valor discreto de freqüência pode ser definido como o inverso do intervalo que decorre entre a passagem de duas frentes consecutivas de golfadas por x_o . Portanto, pode-se escrever:

$$\boldsymbol{v}_{S,n} = \frac{1}{\Delta t_n} \tag{4.56}$$

Para calcular os valores médios de cada um dos parâmetros da golfada (velocidade da frente e cauda, comprimento e freqüência), uma média aritmética é realizada de acordo com as seguintes expressões:

$$\langle U_t \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N} U_{t,n}}{N}, \quad \langle U_b \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N} U_{b,n}}{N},$$

$$\langle L_S \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N} L_{S,n}}{N}, \quad \langle v_S \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N} v_{S,n}}{N}$$

$$(4.57)$$

onde N é o número de medidas realizadas.