4 Método Numérico

As equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia correspondentes a cada fase *k*, apresentadas no Capítulo 3, podem ser escritas como

$$\frac{\partial(\rho_k \alpha_k \phi_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_k \alpha_k U_k \phi_k)}{\partial x} = Sc_{\phi_k} + Sp_{\phi_k}\phi_k \tag{4.1}$$

A Tabela 4.1 ilustra a correspondência entre a variável ϕ_k , os termos de forçamento Sc_{ϕ_k} e Sp_{ϕ_k} e as equações de conservação.

Equação	ϕ_k	Sc_{ϕ_k}	Sp_{ϕ_k}
Massa do gás	1	0	0
Massa do líquido	1	0	0
Quant mov. do gás	U _G	$b_{gr,G} + b_{h,G} + b_{int} U_L - \alpha_G \frac{\partial P}{\partial x}$	$b_{w,G} + b_{int}$
Quant. mov. do líq.	U_L	$b_{gr,L} + b_{h,L} + b_{int} U_G + b_{\sigma} - \alpha_L \frac{\partial P}{\partial x}$	$b_{w,L} + b_{int}$
Energia do gás	T _G	$b_{pr,G} + b_{d_G} + b_{d_{int}} + b_{q,G} T_{w,in}$ $+ b_{q,int} T_L$	$b_{q,G} + b_{q,int}$
Energia do líquido	T_L	$b_{d_L} + b_{d_{int}} + b_{q,L} T_{w,in} + b_{q,int} T_G$	$b_{q,L} + b_{q,int}$

Tabela 4.1 – Termos de forçamento das equações de balanço.

Os termos de fonte das equações de quantidade de movimento, referentes à força de corpo (Eq.4.2), variação de pressão hidrostática (Eq.4.3), atrito na parede (Eq.4.4) e termos interfaciais de atrito e salto de pressão (Eq. 4.4) são

$$b_{gr,G} = -\alpha_G \rho_G g \sin \theta$$
; $b_{gr,L} = -\alpha_L \rho_L g \sin \theta$ (4.2)

$$b_{h,G} = -\alpha_G \rho_G g \cos \theta \frac{\partial h_L}{\partial x} \qquad ; \ b_{h,L} = -\alpha_L \rho_l g \cos \theta \frac{\partial h_L}{\partial x} \tag{4.3}$$

$$b_{w,G} = \frac{1}{2A} f_G \rho_G |U_G| S_G \qquad ; \quad b_{w,L} = \frac{1}{2A} f_L \rho_L |U_L| S_L \qquad (4.4)$$

$$b_{int} = \frac{1}{2A} f_i \rho_G |U_G - U_L| S_i \quad ; \quad b_\sigma = \sigma \alpha_L \frac{\partial \kappa}{\partial x}$$
(4.5)

Os termos de forçamento da equação da energia referentes a troca de calor com a parede e interface são

$$b_{q,G} = \frac{1}{c_{p_G}A} h_G S_G \qquad ; \quad b_{q,L} = \frac{1}{c_{p_L}A} h_L S_L \qquad ; \quad b_{q,int} = \frac{1}{c_{p_k}A} h_i S_i \qquad (4.6)$$

Os termos de dissipação são

$$b_{d_G} = \frac{1}{2 c_{p_G} A} f_G \rho_G |U_G| U_G^2 S_G \qquad ; \quad b_{d_L} = \frac{1}{2 c_{p_L} A} f_L \rho_L |U_L| U_L^2 S_L \quad (4.7)$$

$$b_{d_{int}} = \frac{1}{2 c_{p_k} A} f_i \rho_G |U_G - U_L| (U_G - U_L)^2 S_i$$
(4.8)

e a parcela associada ao gradiente de pressão para fluidos compressíveis, logo, só presente na equação de energia do gás é

$$b_{pr_G} = \frac{1}{c_{p_G}A} \alpha_G \beta_G T_G \left[\left(\frac{\partial P}{\partial t} + U_G \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \rho_G g \cos \theta \left(\frac{\partial h_L}{\partial t} + U_G \frac{\partial h_L}{\partial x} \right) \right]$$
(4.9)

A solução numérica das equações governantes do Modelo de Dois Fluidos foi realizada utilizando-se o método dos volumes finitos (Patankar, 1980), o qual consiste em dividir o domínio de interesse em volumes de controle. A aproximação discreta das equações de conservação escritas na forma conservativa é obtida ao integrar as equações em cada volume de controle. Uma formulação conservativa garante a conservação de massa, quantidade de movimento e energia de cada fase para cada volume de controle e, portanto, para todo o domínio.

De acordo com recomendação de Patankar (1980), de forma a evitar soluções irrealistas e instáveis, optou-se por utilizar uma malha deslocada para as velocidades em relação às outras grandezas. Isto é, as velocidades são armazenadas nas faces dos volumes de controle e as demais grandezas (frações volumétricas, pressões, temperaturas e massas específicas) são armazenadas nos centros dos volumes de controle. A Figura 4.1 ilustra ambos os volumes de controle. As letras maiúsculas P, W e E representam o ponto nodal principal e seus vizinhos da esquerda e da direita, sendo o centro dos volumes de controle onde as grandezas escalares são armazenadas. Já as letras minúsculas w, ww e e

representam as faces dos volumes de controle escalares e seus vizinhos da esquerda e da direita. A malha adotada é uniforme, com espaçamento Δx .



(a) Volume de controle escalar(b)Volume de controle das velocidadesFigura 4.1 – Volumes de controle principal e descolado e respectiva nomenclatura.

Como mencionado, no método de volumes finitos, as equações de discretização são obtidas através da integração no volume de controle de cada variável e no tempo. Ilustrando para uma grandeza escalar, a equação é integrada de acordo com

$$A \int_{w}^{e} \int_{t}^{\Delta t} \frac{\partial(\rho_{k}\alpha_{k}\phi_{k})}{\partial t} dt dx + A \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} \frac{\partial(\rho_{k}\alpha_{k}U_{k}\phi_{k})}{\partial x} dx dt =$$
$$= A \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{w}^{e} (Sc_{\phi_{k}} + Sp_{\phi_{k}}\phi_{k}) dx dt$$
(4.10)

A derivada temporal é integrada primeiro no tempo e depois no espaço. A derivada espacial, por sua vez, é integrada no espaço e posteriormente no tempo. As variáveis armazenadas no ponto nodal do volume de controle prevalecem em todo o volume domínio de integração. O esquema implícito de Euler é utilizado para efetuar a integração no tempo. A equação resultante dividida por Δt é

$$\frac{(\rho_k \alpha_k \phi_k)_P - (\rho_k \alpha_k \phi_k)_P^0}{\Delta t} A \Delta x + (\rho_k \alpha_k U_k A \phi_k)_e - (\rho_k \alpha_k U_k A \phi_k)_w = (Sc_{\phi_k} + Sp_{\phi_k} \phi_k)_P A \Delta x$$
(4.11)

O esquema *upwind* de interpolação é empregado para determinar os termos convectivos nas faces do volume de controle. Detalhes numéricos adicionais das discretizações das equações governantes são apresentados nas seções subsequentes.

4.1 Fração Volumétrica

A equação discretizada de conservação de massa da fase gasosa é

$$a_P \alpha_P = a_E \alpha_E + a_W \alpha_W + b \tag{4.12}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 1312462/CA

sendo os coeficientes acima apresentados obtidos através das seguintes expressões:

$$a_E = \| -\overline{F_{G_e}}, 0 \|$$
 ; $a_W = \| \overline{F_{G_W}}, 0 \|$ (4.13)

$$a_P = A\rho_{G_P} \frac{\Delta x}{\Delta t} + \left\| \overline{F_{G_e}}, 0 \right\| + \left\| -\overline{F_{G_w}}, 0 \right\|$$
(4.14)

$$a_P^0 = A \rho_{G_P}^0 \frac{\Delta x}{\Delta t} \qquad ; \qquad b = a_P^0 \alpha_{G_P}^0 \qquad (4.15)$$

Nas Eqs 4.13 e 4.14 o símbolo ||a, b|| denota o máximo entre $a \in b$. O sobrescrito "0" indica valores avaliados no instante de tempo anterior.

Os pseudo fluxos convectivos são definidos através dos parâmetros $\overline{F_{G_e}}$ e $\overline{F_{G_w}}$, onde as massas específicas das faces são determinadas através do esquema *upwind* de interpolação,

$$\overline{F_{G_{W}}} = \rho_{G_{W}} A \| U_{G_{W}}, 0 \| - \rho_{G_{P}} A \| - U_{G_{W}}, 0 \|$$
(4.16)

$$\overline{F_{G_e}} = \rho_{G_P} A \| U_{G_e}, \ 0 \| - \rho_{G_E} A \| - U_{G_e}, 0 \|$$
(4.17)

Uma vez obtida a fração volumétrica da fase gasosa, a fração volumétrica da fase líquida é obtida através da relação apresentada abaixo.

$$\alpha_L = 1 - \alpha_G \tag{4.18}$$

4.2 Velocidade

As velocidades das fases gasosa e líquida são obtidas das equações discretizadas das equações de conservação da quantidade de movimento. Estas equações são obtidas empregando a Eq. (4.11) no volume de controle deslocado de velocidades. Neste caso, no entanto, o termo de gradiente de pressão é tratado de forma explicita, pois também é uma incógnita. O sistema de equações algébricas resultantes é apresentado a seguir.

$$\frac{a_{w,k}}{\gamma}U_{k_{w}} = a_{e,k}U_{k_{e}} + a_{ww,k}U_{k_{ww}} + b_{k} + (1-\gamma)\frac{a_{w,k}}{\gamma}U_{k_{w}}^{*}$$

$$-\alpha_{k_{w}}A(P_{P} - P_{W})$$
(4.19)

sendo os coeficientes acima apresentados obtidos através das seguintes

expressões:

$$a_{e,k} = \|-F_{k,P}, 0\| \quad ; \quad a_{ww,k} = \|F_{k,W}, 0\| \quad ; \quad a_{w,k}^0 = A\tilde{\rho}_{k_w}^0 \tilde{\alpha}_{k_w}^0 \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.20)$$

$$a_{w,k} = a_{w,k}^0 + a_{e,k} + a_{ww,k} + Sp_{k_w}A\Delta x$$
(4.21)

$$b = a_w^0 U_{k_w}^0 + Sc_{k_w} A\Delta x \tag{4.22}$$

Na Eq. 4.19 foi introduzido um fator de sub relaxação ($\gamma = 0,7$) para reduzir a taxa de variação entre as iterações, uma vez que a solução do problema é não linear. O parâmetro $U_{k_w}^*$ corresponde à velocidade da fase k na face w na iteração anterior.

A massa específica e a fração volumétrica, nas faces do volume de controle principal, são avaliadas com interpolação linear

$$\tilde{\rho}_{k_W} = \frac{(\rho_{k_W} + \rho_{k_P})}{2} \qquad ; \qquad \tilde{\alpha}_{k_W} = \frac{(\alpha_{k_W} + \alpha_{k_P})}{2} \tag{4.23}$$

Os parâmetros F_P e F_W correspondem aos fluxos de massa nas faces do volume de controle da velocidade, i.e., coincidem com o ponto nodal principal. Entretanto, as velocidades não estão disponíveis nos pontos nodais e, portanto, é necessário aplicar um esquema de interpolação. Para garantir a conservação de massa no volume de controle principal e no vetorial, utiliza-se a média aritmética os fluxos nas faces *ww*, *w* e *e* para se avaliar F_P e F_W .

$$F_{k,P} = A\rho_{k_P}\alpha_{k_P}U_{k_P} = \frac{(F_{k,w}+F_{k,e})}{2}; F_{k,W} = A\rho_{k_W}\alpha_{k_W}U_{k_W} = \frac{(F_{k,ww}+F_{k,w})}{2}$$
(4.24)

$$F_{k,w} = A\tilde{\rho}_{k_w}\tilde{\alpha}_{k_w}U_{k_w}; F_{k,ww} = A\tilde{\rho}_{k_{ww}}\tilde{\alpha}_{k_{ww}}U_{k_{ww}} ; F_{k,e} = A\tilde{\rho}_{k_e}\tilde{\alpha}_{k_e}U_{k_e}$$
(4.25)

As parcelas dos termos de fonte $Sc_{U_k} e Sp_{U_k}$ ilustradas nas Eqs. 4.2 a 4.5 são aproximadas nas faces *w*, onde as velocidades são armazenadas. Logo, a massa específica e fração volumétrica da fase *k* são necessárias nas faces, para o cálculo dos termos de forçamento, sendo determinadas como indicado na Eq. (4.23). Os termos associados com a variação da pressão hidrostática, devido a variação do nível de líquido são

$$b_{h_k} = -\tilde{\rho}_{k_w} \tilde{\alpha}_{k_w} g \, \frac{\left(h_{L_P} - h_{L_W}\right)}{\Delta x} \cos\theta \tag{4.26}$$

Note que o termo de salto de pressão só contribui para a equação de conservação de quantidade de movimento do líquido. Este termo possui duas parcelas, a primeira associada com variações axiais do nível do líquido presente para escoamento estratificado e anular e a segunda parcela $(b_{\sigma,an})$, devido a curvatura na seção transversal, o qual só existe no caso de escoamento anular. Temos então que

$$\frac{A}{\Delta t} \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{W}^{P} b_{\sigma} \, dx dt = b_{\sigma,axial} + b_{\sigma,an} \tag{4.27}$$

$$b_{\sigma,axial} = A \sigma \,\tilde{\alpha}_{L_W} \frac{\left(h_{L_E} + 3 \, h_{L_W} - h_{L_{WW}} - 3 h_{L_P}\right)}{(\Delta x)^2} \tag{4.28}$$

$$b_{\sigma,an} = A \sigma \,\tilde{\alpha}_{L_W} \left(\frac{4}{D^2 \,\tilde{\alpha}_{G_W}}\right) \frac{\left(h_{L_P} - h_{L_W}\right)}{\Delta x} \tag{4.29}$$

Os cálculos dos perímetros molhados S_{L_w} , S_{G_w} e S_{i_w} são realizados através das Eqs. 3.3 ou 3.8, dependendo se o escoamento base é estratificado ou anular, em função da altura do nível líquido h_L . A espessura do filme de líquido é facilmente obtida pela Eq. 3.10 para escoamento base anular. Já no caso de escoamento base estratificado, o nível de líquido pode ser obtido pela solução da Eq. 3.6, utilizando um método iterativo, como o método da bisseção (Press, 1992). No entanto, para acelerar a convergência, pode-se utilizar a equação aproximada proposta por Biberg (1999), Eq. 3.7. Os fatores de atrito são obtidos em função do número de Reynolds de acordo com as correlações apresentadas na Tabela 3.1.

4.3 Pressão

A equação de conservação de massa total, obtida através da combinação das equações de conservação das fases gasosa e líquida, é utilizada para determinar a equação da pressão. Para esta combinação, ambas equações são normalizadas pelas massas específicas de referência de cada fase. A normalização evita que haja predominância da equação do líquido sobre a equação do gás, o que poderia induzir à problemas de convergência (Issa e Kempf, 2003; Bonizzi, 2003; Carneiro, 2005; Simões, 2012). A equação algébrica resultante é apresentada a seguir.

$$\frac{\partial(\alpha_L)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_L U_L)}{\partial x} + \frac{1}{\rho_{G_{ref}}} \left(\frac{\partial(\alpha_G \rho_G)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_G \rho_G U_G)}{\partial x} \right) = 0$$
(4.30)

A discretização da Eq. 4.30 é obtida integrando no volume de controle principal, assim como a equação de conservação de massa da fase gasosa. A equação de discretização resultante é

$$A\left(\alpha_{L_P} - \alpha_{L_P}^{0}\right)\frac{\Delta x}{\Delta t} + A\hat{\alpha}_{L_e}U_{L_e} - A\hat{\alpha}_{L_w}U_{L_w} + \frac{1}{\rho_{G_{ref}}}\left[A\left(\rho_{G_P}\alpha_{G_P} - \rho_{G_P}^{0}\alpha_{G_P}^{0}\right)\frac{\Delta x}{\Delta t} + A\hat{\rho}_{G_e}\hat{\alpha}_{G_e}U_{G_e} - A\hat{\rho}_{G_w}\hat{\alpha}_{G_w}U_{G_w}\right] = 0 (4.31)$$

Os termos de pressão são introduzidos através da substituição das velocidades das faces, obtidas da equação discretizada de quantidade de movimento, Eq. 4.19, reescritas como apresentado abaixo.

$$U_{k_W} = \widehat{U}_{k_W} - \frac{\widetilde{a}_{k_W}A}{a_{k,w}/\gamma} (P_P - P_W) \quad e \quad U_{k_e} = \widehat{U}_{k_e} - \frac{\widetilde{a}_{k_e}A}{a_{k,w}^+/\gamma} (P_E - P_P) \quad (4.32)$$

onde as pseudo velocidades \hat{U}_{k_w} e \hat{U}_{k_e} obtidas através das seguintes expressões:

$$\widehat{U}_{k_{W}} = \frac{a_{k,e}U_{k_{e}} + a_{k,ww}U_{k_{WW}} + b_{k} + (1-\gamma)(a_{k,w}/\gamma)U_{k_{W}}^{*}}{a_{k,w}/\gamma}$$
(4.33)

$$\widehat{U}_{k_e} = \frac{a_{k,e}^+ U_{k_{ee}} + a_{k,ww}^+ U_{k_w} + b_k^+ + (1-\gamma)(a_{k,w}^+/\gamma)U_{k_e}^*}{a_{k,w}^+/\gamma}$$
(4.34)

O sobrescrito "+" indica que a equação de discretização de quantidade de movimento linear da fase k deve ser avaliada no volume de controle adjacente ao volume de controle deslocado de interesse correspondente à velocidade w.

A massa específica do gás no ponto nodal depende da pressão através da equação de estado.

$$\rho_G = \frac{P}{Z R_G T_G} \tag{4.35}$$

A equação de discretização da pressão é obtida a partir da substituição das Eqs. 4.32 a 4.34 na Eq. 4.31. O sistema de equações algébricas resultantes é

$$a_P P_P = a_W P_W + a_E P_E + b \tag{4.36}$$

sendo os coeficientes acima apresentados obtidos através das seguintes

expressões:

$$a_W = \frac{A^2 \hat{\rho}_{G_W} \hat{\alpha}_{G_W} \hat{\alpha}_{G_W}}{(a_{G,W}/\gamma) \rho_{G_{ref}}} + \frac{A^2 \hat{\alpha}_{L_W} \hat{\alpha}_{L_W}}{(a_{L,W}/\gamma)}$$
(4.37)

$$a_E = \frac{A^2 \,\hat{\rho}_{G_e} \,\hat{\alpha}_{G_e} \,\hat{\alpha}_{G_e}}{(a^+_{G,w}/\gamma)\rho_{G_{ref}}} + \frac{A^2 \,\hat{\alpha}_{L_e} \,\hat{\alpha}_{L_e}}{(a^+_{L,w}/\gamma)} \tag{4.38}$$

$$a_P = \frac{\alpha_{G_P} A \Delta x}{\rho_{G_{ref}} R_G T_{G_P} \Delta t} + a_E + a_W \tag{4.39}$$

$$b_{P} = \left[\alpha_{L_{P}}^{0} - \alpha_{L_{P}} + \frac{\left(\rho_{G_{P}}^{0}\alpha_{G_{P}}^{0}\right)}{\rho_{G_{ref}}}\right] \frac{A\Delta x}{\Delta t} + \frac{1}{\rho_{G_{ref}}} \left(A\hat{\rho}_{G_{W}}\hat{\alpha}_{G_{W}}\hat{U}_{G_{W}} - A\hat{\rho}_{G_{e}}\hat{\alpha}_{G_{e}}\hat{U}_{G_{W}}\right) + \left(A\hat{\alpha}_{L_{W}}\hat{U}_{L_{W}} - A\hat{\alpha}_{L_{e}}\hat{U}_{L_{e}}\right)$$
(4.40)

4.4 Temperatura

A equação da energia é utilizada para a determinação das temperaturas das fases gasosa e líquida. A discretização desta equação também é realizada integrando no volume de controle principal, Eq. (4.11) resultando na seguinte equação de discretização

$$a_P T_{k_P} = a_E T_{k_E} + a_W T_{k_W} + b ag{4.41}$$

sendo os coeficientes obtidos através das seguintes expressões:

$$a_E = \| -\hat{F}_{k_e}, 0 \| \quad ; \quad a_W = \| \hat{F}_{k_W}, 0 \| \quad ; \quad a_P^0 = A \rho_{k_P}^0 \alpha_{k_P}^0 \frac{\Delta x}{\Delta t}$$
(4.42)

$$a_{P} = a_{E} + a_{W} + a_{P}^{0} - Sp_{k_{P}}A\Delta x \quad ; \quad b = a_{P}^{0}T_{k_{P}}^{0} + Sc_{k_{P}}A\Delta x \quad (4.43)$$

Neste caso, os fluxos de massa nas faces do volume controle, \hat{F}_{k_e} e \hat{F}_{k_w} , são obtidos baseados nos pseudo fluxos de massa (Eq. 4.16 e 4.17) e utilizando esquema de interpolação *upwind* para as frações volumétricas.

$$\widehat{F}_{k_W} = \alpha_{k_W} A \|\overline{F_{k_W}}, 0\| - \alpha_{k_P} A \| - \overline{F_{k_W}}, 0\|$$
(4.44)

$$\widehat{F}_{k_e} = \alpha_{k_P} A \|\overline{F_{k_e}}, 0\| - \alpha_{k_E} A \| - \overline{F_{k_e}}, 0\|$$
(4.45)

Uma vez que a temperatura é armazenada no centro do volume de controle,

os termos de fonte indicados nas Eqs. (4.6) a (4.9) são determinados no ponto nodal *P*. Os termos associados ao fluxo de calor, Eq. (4.6), são diretamente avaliados no ponto nodal principal. Porém, como a velocidade é armazenada nas faces, e as tensões cisalhantes são determinadas nas faces para serem aplicadas nas equações de conservação de quantidade de movimento, os termos de dissipação, Eqs. (4.7) e (4.8), são avaliados conforme indicado a seguir

$$b_{d_{k_{P}}} = \frac{1}{4 c_{p_{k}} A} \left(f_{k_{w}} \tilde{\rho}_{k_{w}} \big| U_{k_{w}} \big| S_{k_{w}} + f_{k_{e}} \tilde{\rho}_{k_{e}} \big| U_{k_{e}} \big| S_{k_{e}} \right) \widetilde{U}_{k_{P}}^{2}$$
(4.46)

$$b_{d_{int}} = \frac{1}{4 c_{p_k} A} \left(f_{i_w} \tilde{\rho}_{G_w} \left| U_{G_w} - U_{L_w} \right| S_{i_w} + f_{i_e} \tilde{\rho}_{k_e} \left| U_{G_e} - U_{L_e} \right| S_{i_e} \right) (\tilde{U}_{G_P} - \tilde{U}_{L_P})^2$$
(4.47)

Sendo a velocidade no ponto nodal central determinada através da média aritmética dos valores da face leste e oeste:

$$\widetilde{U}_{k_P} = \frac{\left(U_{k,w} + U_{k,e}\right)}{2} \tag{4.48}$$

O termo associado com a pressão devido a efeitos de compressibilidade, Eq. (4.9), só é incluído na equação da energia do gás, pois depende de β , coeficiente de compressibilidade térmica,

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T} \Big|_{P} \tag{3.49}$$

o qual é nulo no caso de fluido incompressível. Para gás ideal $\beta_G=1/T_G$ e para gases reais, o coeficiente de expansão térmica foi calculado numericamente como

$$\beta = -\frac{1}{\rho(P,T_G)} \frac{\rho(P,T_G + \delta T) - \rho(P,T_G)}{\delta T}$$
(4.50)

onde δT é um valor pequeno. Neste trabalho empregou-se $\delta T = 0,2$ K.

O termo associado a pressão na equação de energia do gás é aproximado de acordo com

$$b_{pr_{G}} = \frac{\alpha_{G_{P}}\beta_{G_{P}}T_{G_{P}}}{c_{p_{G_{P}}}A} \Big\{ (P_{P} - P_{P}^{0}) \frac{\Delta x}{\Delta t} +$$

$$[\|\widetilde{U}_{G_{P}}, 0\|(P_{P} - P_{W}) - \| - \widetilde{U}_{G_{P}}, 0\|(P_{E} - P_{P})] \\ + \rho_{G_{P}} g \cos\theta \Big[(h_{L_{P}} - h_{L_{P}}^{0}) \frac{\Delta x}{\Delta t} + \widetilde{U}_{G_{P}} (h_{L_{e}} - h_{L_{W}}) \Big] \Big\}$$
(4.51)

4.5 Condições de Contorno e Iniciais

A Figura 4.2 ilustra os volumes de controle para grandezas escalar utilizados na entrada (Fig 4.2a) e na saída (Fig 4.2b), os quais possuem a metade do tamanho do interior do domínio, $\Delta x/2$.

Na entrada da tubulação, as velocidades superficiais (ou vazões) e temperaturas de ambas as fases são fornecidas. A fração volumétrica na entrada é obtida de forma a satisfazer a equação de conservação de massa do gás no meio volume de controle indicado na Fig. 4.2a. As velocidades das fases podem ser facilmente calculadas, a partir das velocidades superficiais e frações volumétricas.



Figura 4.2 - Volumes de controle escalar da (a) entrada e (b) saída.

A pressão é determinada através solução da equação de conservação global de massa aplica ao meio volume de controle da entrada, com as vazões em massa das duas fases impostas na entrada.

Na saída da tubulação, apenas a pressão é fornecida. Para determinar as velocidades de ambas as fases na saída é feita uma extrapolação linear utilizando os valores dos nós *W* e *WW* (primeiros dois vizinhos internos). Já para determinar as temperaturas de ambas as fases se considera o escoamento como localmente altamente convectivo, isto é, despreza-se a variação da temperatura no último meio volume de controle, sendo o nó da saída igual ao nó adjacente anterior.

Como condição inicial, considera-se que os dados fornecidos de velocidade, e temperatura na entrada e pressão na saída, são constantes em todo o domínio. A condição inicial para a fração volumétrica no domínio corresponde ao valor de equilíbrio. Esta grandeza na entrada é calculada de forma a garantir a conservação de massa.

4.6 Malha Computacional

O espaçamento da malha Δx utilizado influência no processo de discretização. No esquema de interpolação *upwind* há geração de grande difusão numérica no sistema. Para contrabalancear este fato, é necessário se utilizar malhas refinadas para atingir a precisão desejada. A resolução espacial deve ser escolhida de modo que respeite o compromisso entre precisão dos cálculos numéricos e o tempo necessário de computação (Carneiro, 2006). Para cada caso de interesse, um teste de malha foi especificado.

4.7 Critérios para o Passo de Tempo

O passo de tempo em escoamentos no regime transiente deve ser limitado de modo a atender os requisitos de precisão temporal da solução. No caso de escoamentos bifásicos, isto quer dizer que precisa ser suficientemente pequeno para capturar as instabilidades geradas pelas golfadas ou ondulações de um escoamento anular. A equação apresentada abaixo foi utilizada para definir o passo de tempo.

$$\Delta t = C \frac{\Delta x}{max(|U|)} \tag{4.52}$$

onde *C* é número de Courant, que expressa a quantidade de volumes de controle que uma partícula de fluido consegue avançar em cada passo de tempo, Δx representa o espaçamento utilizado na malha e max(|U|) a velocidade máxima em todo o domínio, para ambas as fases. Portanto, para um *C* unitário, a partícula avança somente um volume de controle por passo de tempo. Note que, quanto mais densa for à malha, menor será o passo de tempo.

Logo, para a determinação de um passo de tempo, deve-se levar em consideração a influência em conjunto do número de Courant e da densidade da malha, assim como características físicas do problema e limitações computacionais (por exemplo: memória disponível e tempo de execução). De acordo com recomendação de Nieckele et al. (2013), selecionou-se C=0,05 para todos os casos.

4.8 Critérios de Convergência

O critério do resíduo máximo é utilizado para determinara à convergência a cada passo de tempo.

$$Res_{max} = \max|a_P\phi_P - (a_E\phi_E + a_W\phi_W + b)|$$

$$(4.53)$$

Nesta equação, ϕ é grandeza dependente de interesse calculada na iteração anterior e a_P , a_E , a_W e b são os coeficientes da equação de discretização de ϕ calculados na iteração atual.

A solução é considerada convergida quando o resíduo máximo, obtido em todo o domínio, de todas as equações for inferior ao valor de tolerância especificado. No presente trabalho a tolerância especificada foi de $tol=10^{-5}$.

$$Res_{max} \le tol$$
 (4.54)

4.9 Procedimento de Execução

O sistema de equações governantes é formado por duas equações para determinar as velocidades das fases, uma para determinar a fração volumétrica da fase gás, uma para determinar a pressão e duas para determinar as temperaturas das fases. A solução de cada equação é realizada através da resolução de matrizes tri-diagonais pelo algoritmo TDMA (Patankar,1980). Tais matrizes são formadas pelas equações governantes discretizadas, onde o nó principal depende somente dos nós adjacentes.

No presente trabalho, uma adaptação do algoritmo PRIME (Maliska, 1981), conforme sugerido por Ortega e Nieckele (2005) foi utilizado para tratar o acoplamento velocidade-pressão. Este mesmo procedimento foi utilizado com sucesso nos trabalhos de Nieckele et al. (2013) e Simões et al. (2014).

O procedimento de solução deste algoritmo é descrito, em detalhes, abaixo. O fluxograma é apresentado em seguida (Fig. 4.3)

- Definição da geometria, propriedades, condições de contorno, parâmetros numéricos de solução como malha, passo de tempo, critério de convergência, etc.
- Definição das condições iniciais do problema (i.e: inicialização das velocidades, pressão, frações volumétricas, temperaturas).

- 3. Utilização da solução do passo de tempo anterior como estimativa inicial para a solução do passo de tempo atual.
- Determinação das velocidades das fases, através da solução das equações de quantidade de movimento para gás e líquido (Eq.4.10), utilizando o campo de pressão estimado.¹
- Determinação da pressão através da solução da equação de conservação de massa global (Eq.4.30)
- 6. Correção explicita das velocidades mediante a Eq. $(4.19)^2$
- Solução da equação de conservação de massa da fase gasosa (Eq.4.12) para obtenção da fração volumétrica do gás.
- Solução da equação de conservação de energia para o gás e para o líquido, obtendo valores de temperatura (Eq.4.41).³
- 9. Cálculo dos resíduos de todas as equações. Se inferiores ao critério de tolerância determinado, o programa retorna ao "passo 3". Se não, o programa retorna ao "passo 4", utilizando os últimos valores calculados como estimativas, e repete o procedimento até obter a convergência.

¹Neste ponto, as velocidades obtidas satisfazem somente a equação de quantidade de movimento.

² Neste ponto, as velocidades obtidas satisfazem a equação de conservação de massa global.

³ Os valores de temperatura do instante anterior são utilizados para o cálculo do fluxo de calor com a parede (quando a temperatura externa é imposta) e o fluxo de calor na interface.



Figura 4.3 – Fluxograma de solução do algoritmo TDMA.