

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Simulação Numérica da Concentração de uma Substância Diluída em um Fluido com Fluxo em Torno de Obstáculos Sólidos

Vitor J. Petry¹

Área de Matemática, UFFS, Chapecó, SC

Pedro E. Weber²

Área de Matemática, UTFPR, Medianeira, PR

Resumo. Este trabalho é resultado de uma pesquisa numérica que tem como finalidade descrever a distribuição da concentração de uma substância qualquer lançada em alguma posição do domínio do fluxo de um fluido que passa entre obstáculos sólidos. O problema é resolvido em duas dimensões, sendo o perfil de velocidades obtido pelas equações de Navier-Stokes. A distribuição da concentração é obtida pela equação da advecção-difusão. Resultados numéricos são apresentados para algumas das situações simuladas.

Palavras-chave. Modelagem matemática, Distribuição da concentração, Fluxo em torno de sólidos.

1 Introdução

No presente trabalho são apresentados resultados de pesquisas numéricas desenvolvidas com a finalidade de compreender a distribuição da concentração de uma determinada substância diluída em um fluido que flui em um duto que contém obstáculos sólidos. Essa situação aplica-se, por exemplo, quando tentamos descrever o processo de transferência de calor e massa em meios granulares que ocorre durante a secagem de grãos. É fato que o fluxo de calor e de massa nesse processo é influenciado pelo perfil da velocidade do fluido que passa por entre os obstáculos sólidos. Nos processos de secagem, o fluido é o ar, os obstáculos sólidos são os grãos e a substância diluída no fluido é o vapor d'água. Diversos trabalhos tem sido desenvolvidos, tentando descrever os processos de secagem utilizando diferentes modelagens para considerar a influência da velocidade neste processo. Maiores detalhes sobre alguns destes trabalhos são encontrados em [4]. Embora o modelo desenvolvido possa ser aplicado em inúmeras outras situações, devido a sua generalidade de possibilidades de domínios, nas simulações apresentadas neste trabalho consideram o caso bidimensional de um meio granular. Considera-se neste caso uma sequência de

¹ vitor.petry@uffs.edu.br

² pedroelton@utfpr.edu.br

círculos sólidos (grãos) e espaços vazios entre esses círculos por onde o fluido (ar) deve circular. Esta situação é idêntica ao que ocorre nos processos de secagem de grãos.

O perfil de velocidade do fluxo do fluido em torno dos obstáculos é obtido a partir das equações de Navier-Stokes usando o método Sola descrito em detalhes por [1–3]. Os procedimentos numéricos para a obtenção do fluxo estão descritos em [5]. O código desenvolvido consegue a partir de uma matriz de dados fornecida (em sistema binário) localizar pontos internos ao domínio de passagem do fluido, pontos externos (pontos pertencentes ao obstáculo sólido) e os pontos de fronteira. Isso permite que o mesmo código computacional seja utilizado para diferentes geometrias de obstáculos, inclusive em meios porosos, onde os obstáculos são irregulares ou para descrever o fluxo de água em rios e lagos, onde as margens são irregulares. Para a geração da matriz binária que descreva o domínio a partir de figuras da região em estudo foi desenvolvida uma rotina de leitura e processamento de imagens, usando os comandos do *Maple* para esta finalidade.

Após calculado o perfil da velocidade do fluido que contorna os obstáculos sólidos passou-se a simular a distribuição da concentração de uma substância (genérica) inserida em alguma posição do domínio de passagem do fluido ao longo do tempo. Para estas simulações foi usada a equação da advecção-difusão. Esta equação foi resolvida usando um método implícito em diferenças finitas.

Na sequência são apresentadas as equações governantes do modelo e uma breve descrição dos métodos e procedimentos de solução. Em seguida são apresentados alguns dos resultados obtidos nas simulações numéricas e por fim, algumas considerações na forma de conclusões.

2 Equações governantes e procedimentos de solução

Para descrever o fluxo de ar em torno dos obstáculos são utilizadas as equações de Navier-Stokes em um conjunto de pontos $\Omega \subset \mathbf{R}^2$, onde Ω representa a região que está livre para a circulação do ar. São utilizadas as equações de momento em duas dimensões:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial(uv)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right] \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial(uv)}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right] \quad (2)$$

onde Re é o número de Reynolds e a equação da continuidade para um escoamento incompressível:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

Estas equações foram resolvidas numericamente em diferenças finitas, usando o método Sola, que consiste em aproximar os valores u e v da velocidade de forma explícita a partir das equações (1) e (2) e a pressão de forma implícita, utilizando um processo iterativo para esta aproximação buscando satisfazer a equação (3).

Para possibilitar a utilização de aproximações de segunda ordem para a pressão e evitar o risco de ocorrência de campos oscilatórios de pressão oriundos dessas discretizações, foi usada malha deslocadas onde os valores das componentes da velocidade são calculados nas "arestas" de cada célula, enquanto que a pressão é obtida no centro da célula, conforme mostrado na figura 1.

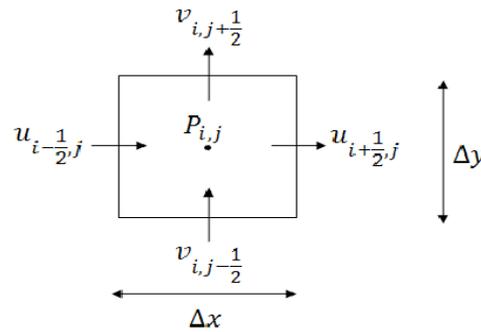


Figura 1: Célula de posição (i, j) com malha deslocada.

A partir da obtenção do perfil da velocidade do fluxo do fluido é possível descrever a distribuição, ao longo do tempo, da concentração de uma substância qualquer que seja introduzida em alguma posição do domínio do fluxo. Para o cálculo dessa distribuição é usada a equação da advecção-difusão (4).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} - v \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{1}{Re.Sc} \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right] \quad (4)$$

para $0 < x < L$, $0 < y < K$ e $t > 0$, onde L e K são tais que Ω esteja contido no produto cartesiano $[0, L] \times [0, K]$ e Sc é o número de Schmidt. Considera-se condições de contorno de Neumann nas fronteiras dos obstáculos sólidos que delimitam o domínio. Na entrada do domínio são considerados duas situações distintas (Neumann e Dirichlet) enquanto que na saída é considerada condição de Neumann. A condição inicial é definida no domínio, considerando a posição (ou as posições) em que a substância em questão é inserida no fluido. A equação (4) é resolvida na sua forma adimensional, usando o método implícito de Crank-Nicolson em diferenças finitas centrais para aproximar as derivadas espaciais e diferenças avançadas para a derivada temporal. A concentração é calculada no centro de cada célula representada na figura 1. As componentes da velocidade no centro da célula são aproximadas por interpolação.

Após a discretização da equação (4) e aplicação das condições de contorno, o problema pode ser escrito na forma matricial:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}^{n+1} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}^n \quad (5)$$

onde \mathbf{A} e \mathbf{B} são matrizes formadas em blocos, conforme segue:

3 Resultados

Simulações numéricas foram realizadas com diferentes domínios de fluxo e diversos valores dos números adimensionais envolvidos. Foram feitos testes com duas situações de condições na entrada do duto de passagem do fluido. Uma com condições de Neumann, isto é: $\frac{\partial C}{\partial x}(t, 0, y) = 0, t > 0$ e outra com condições de Dirichlet: $C(t, 0, y) = 1, t > 0$. Nesta secção são apresentados apenas os resultados das simulações para estas duas situações, mantendo inalteradas as demais variáveis. Estas situações são apresentadas nas figuras 3 e 4, respectivamente. Em ambos os casos é usado um fluxo do fluido por um duto em duas dimensões, calculado conforme descrito em [5]. Considera-se o domínio de fluxo em torno de círculos postos de forma simétrica no duto, a fim de simular um meio granular, conforme motrado na figura 2, estando a entrada do fluxo no lado esquerdo e a saída no lado direito. São deixados espaçamentos entre os círculos para possibilitar a passagem do fluido. Considera-se nestas simulações, $Re = 50$ e $Sc = 1.7$. O problema com condições de entrada de Neumann está descrito na secção anterior. Já para o problema de Dirichlet, as matrizes do sistema (5) sofrem algumas alterações. Considera-se um duto de comprimento 50% maior do que a largura e uma malha com 96x65 células. As simulações com condições de Neumann e Dirichlet são apresentadas nas figuras 3 e 4, respectivamente.

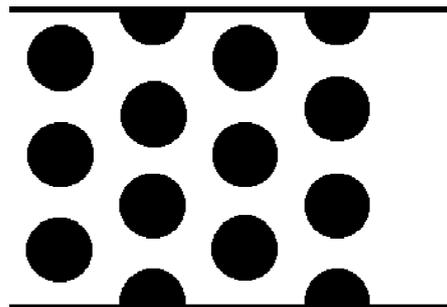


Figura 2: Representação do domínio de fluxo no duto com obstáculos sólidos (esquerda) e perfil de velocidade (direita)

Na simulação representada na figura 3 considera-se a introdução de uma concentração de valor igual a 1,0 (adimensional) nas duas primeiras células da malha do lado esquerdo, isto é, para $i = 1, 2$ e para todo $j = 1, 2, \dots, J$, enquanto que nas demais células tem-se $C_{i,j}^0 = 0$. Observa-se nesta situação a concentração elevada na entrada do duto no início da simulação, ocorrendo rápida dissipação desta concentração que se espalha por todo o domínio. Observa-se ainda valores mais acentuados da concentração nas posições em que o módulo do vetor velocidade é maior, o que tem relação direta com as linhas de fluxo, proporcionando aumento da convecção para estas regiões. Após passado algum tempo, o valor da concentração fica mais baixo na entrada do duto, visto que a substância introduzida inicialmente nesta posição é levada pelo fluxo do fluido até a saída do duto. Para simulações com tempos mais longos, o valor da concentração se aproxima de zero.

Na simulação representada na figura 4 considera-se que a fonte de entrada da substância se mantém ao longo do tempo de forma a manter o nível de concentração constante e igual

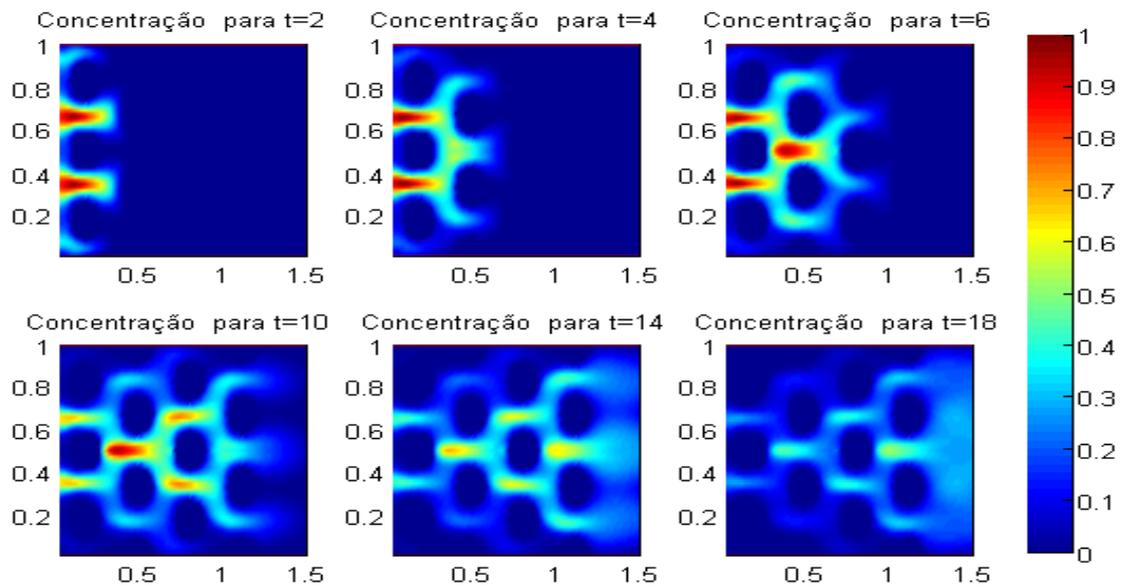


Figura 3: Distribuição da concentração ao longo do tempo t (adimensional) para condição de entrada de Neumann.

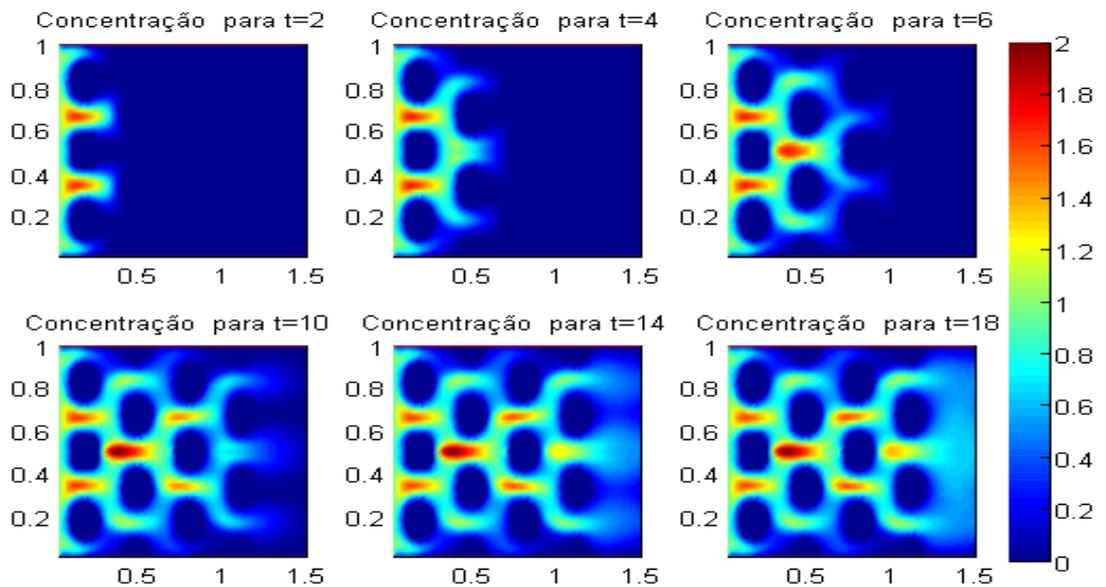


Figura 4: Distribuição da concentração ao longo do tempo t (adimensional) para condição de entrada de Dirichlet.

a unidade em toda a extensão da entrada do duto. Como consequência disto, seu nível no interior do duto se mantém elevado ao longo do tempo de forma a registrar valores

elevados em todo o domínio do fluxo. Os valores da concentração chegam a aproximadamente o dobro do valor da entrada em alguns dos pontos com maior velocidade de fluxo. A condição inicial é a mesma usada na simulação anterior. Para simulações com tempos maiores, o teor de concentração entra praticamente em regime estacionário, não apresentando alterações significativas em relação ao apresentado para $t = 18$. Isto sugere que o quantitativo da substância inserida na entrada do duto para manter a concentração constante é aproximadamente igual à quantidade que passa pela saída do duto.

4 Conclusões

Neste trabalho foi utilizado um modelo matemático baseado nas equações de Navier-Stokes para descrever o fluxo de um fluido em torno de obstáculos sólidos. A partir do perfil de velocidades foi calculada a distribuição, ao longo do tempo e do domínio, da concentração de uma substância que seja lançada em uma posição qualquer do duto pelo qual passa o fluido. Visto que o código computacional desenvolvido tem a capacidade de identificar os pontos internos, de fronteira (inclusive o tipo de fronteira em questão) e externos ao domínio de passagem do fluido, o modelo pode ser usado em diferentes situações, com geometrias bem diferenciadas. Isto amplia significativamente sua aplicabilidade em diferentes situações. Destacamos aqui sua utilização na descrição do problema de transferência de calor e massa que ocorrem nos processos de secagem de grãos, situação para a qual foram feitas as simulações apresentadas, bem como para descrever o espalhamento de alguma substância ou resíduo que possa ser lançado em algum lago ou rio. Nas simulações apresentadas, observa-se que os resultados obtidos numericamente representam satisfatoriamente o perfil de distribuição esperado para os problemas físicos em questão. O trabalho consiste em uma pesquisa numérica de forma que até o momento não se tem comparações com dados experimentais.

Referências

- [1] A. O. Fortuna, *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos - conceitos básicos e aplicações*, Edusp, São Paulo, 2000.
- [2] C.W. Hirt, B.D. Nichols and N.C. Romero, *SOLA - A numerical solution algorithm for transient fluid flow*, April, 1975.
- [3] C.W Hirt, B.D Nichols, Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *Journal of Computational Physics*, 39:201-225, 1981.
- [4] V.J. Petry, A.L. De Bortoli and O. Khatchaturian, Development of a mathematical model for heat and mass transfer inside a granular medium, *Proceedings of the Computational Methods in Engineering and Science*, Sanya, Hainan, China, 2006.
- [5] V. J. Petry, P. E. Weber. Modelagem Bidimensional do Fluxo de um Fluido em Torno de Obstáculos Sólidos. In *Anais do Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional (XXXIV CNMAC)*, Águas de Lindóia, São Paulo, Brasil, 2012.