



UNICAMP



**FACULDADE DE
ENGENHARIA
QUÍMICA**

UNICAMP

Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD) no desenvolvimento de Microrreatores

Prof. Dr. Harrson S. Santana

EQ 023 – Tópicos em Engenharia de Reações
Químicas: Introdução à Microrreatores

Conteúdo da Aula

Introdução a Dinâmica dos Fluidos Computacional

Metodologia CFD

Geometria e Malha Numérica

Modelagem Matemática

Caso de estudo 1: mistura entre dois fluidos –
determinação do índice de mistura

Caso de estudo 2: mistura e reação química homogênea
– síntese de biodiesel

Introdução

► **CFD – *Computational Fluid Dynamics*:**

- CFD pode ser entendida como a combinação de física, cálculo e ciências computacionais objetivando a descrição do comportamento do escoamento.
- É usada na análise de sistemas com escoamento e outros fenômenos (físicos ou físico-químicos associados), podendo incluir, por exemplo, transferência de massa e de calor, e reações químicas homogêneas ou heterogêneas.

Introdução

- ▶ **Avanço computacional:**

- CFD tem se tornado um ferramenta essencial para engenheiros na área de projeto e otimização de equipamentos e processos, incluindo aplicações na área de Microfluidica.

Introdução

- ▶ **Solver (padrão) de CFD** – *hipótese do contínuo*

Conservação
de Massa total
(Continuidade)

Navier-Stokes
(Momentum)

- ▶ *Solver básico – escoamento isotérmico, fluido puro.*
- ▶ *Predição do campo de velocidade e pressão*

Introdução e Aplicações

- ▶ **Solver (padrão) de CFD** – *hipótese do contínuo*

Conservação
de Massa total
(Continuidade)

Navier-Stokes
(Momentum)

Balanço de
massa das
espécies

- ▶ *Escoamento isotérmico, mistura multicomponente (n espécies químicas).*
- ▶ *Predição do campo de velocidade, pressão e distribuição das espécies químicas.*

Introdução

- ▶ **Solver (padrão) de CFD** – *hipótese do contínuo*

Conservação
de Massa total
(Continuidade)

Navier-Stokes
(Momentum)

Balanço de
massa das
espécies

Conservação
de energia total

- ▶ *Escoamento com efeitos térmicos, mistura multicomponente (n espécies químicas).*
- ▶ *Predição do campo de velocidade, pressão, distribuição das espécies químicas e temperatura.*

Introdução

► Vantagens do CFD:

- Redução de custo e tempo em projetos (ex. simulação e análise de vários designs).
- Grande detalhamento dos resultados (solução fornece o campo de escoamento).
- Predição de propriedades em condições severas de operações, onde medições experimentais são inviáveis.

Introdução

▶ Precauções do CFD:

▶ Deve-se atentar aos:

- Erros numéricos intrínsecos;
- Hipóteses usadas na modelagem matemática.

▶ Deve-se validar o modelo matemático simulado com base em dados experimentais e/ou correlações empíricas.

Metodologia CFD

Etapa 1. Pré-Processamento

Definição da geometria e criação da malha numérica;
Definição das propriedades do sistema; modelos matemáticos e numéricos.

Etapa 2. Solução da Simulação (Processamento)

Solução das equações de transporte com base nas definições;
Monitoramento da convergência numérica;

Etapa 3. Pós-Processamento

Tratamento dos dados obtidos;
Visualização e interpretação dos resultados.

Metodologia CFD

Etapa 1. Pré-Processamento

Definição da geometria e criação da malha numérica;

Definição das propriedades do sistema; modelos matemáticos e numéricos.

Etapa 2. Solução da Simulação (Processamento)

Solução das equações de transporte com base nas definições;
Monitoramento da convergência numérica;

Etapa 3. Pós-Processamento

Tratamento dos dados obtidos;
Visualização e interpretação dos resultados.

Explicado a frente nos casos de estudo 1 (mistura) e 2 (mistura com reação química)

Metodologia CFD

Etapa 1. Pré-Processamento

Definição da geometria e criação da malha numérica;

Definição das propriedades do sistema; modelos matemáticos e numéricos.

Etapa 2. Solução da Simulação (Processamento)

Solução das equações de transporte com base nas definições;

Monitoramento da convergência numérica;

Etapa 3. Pós-Processamento

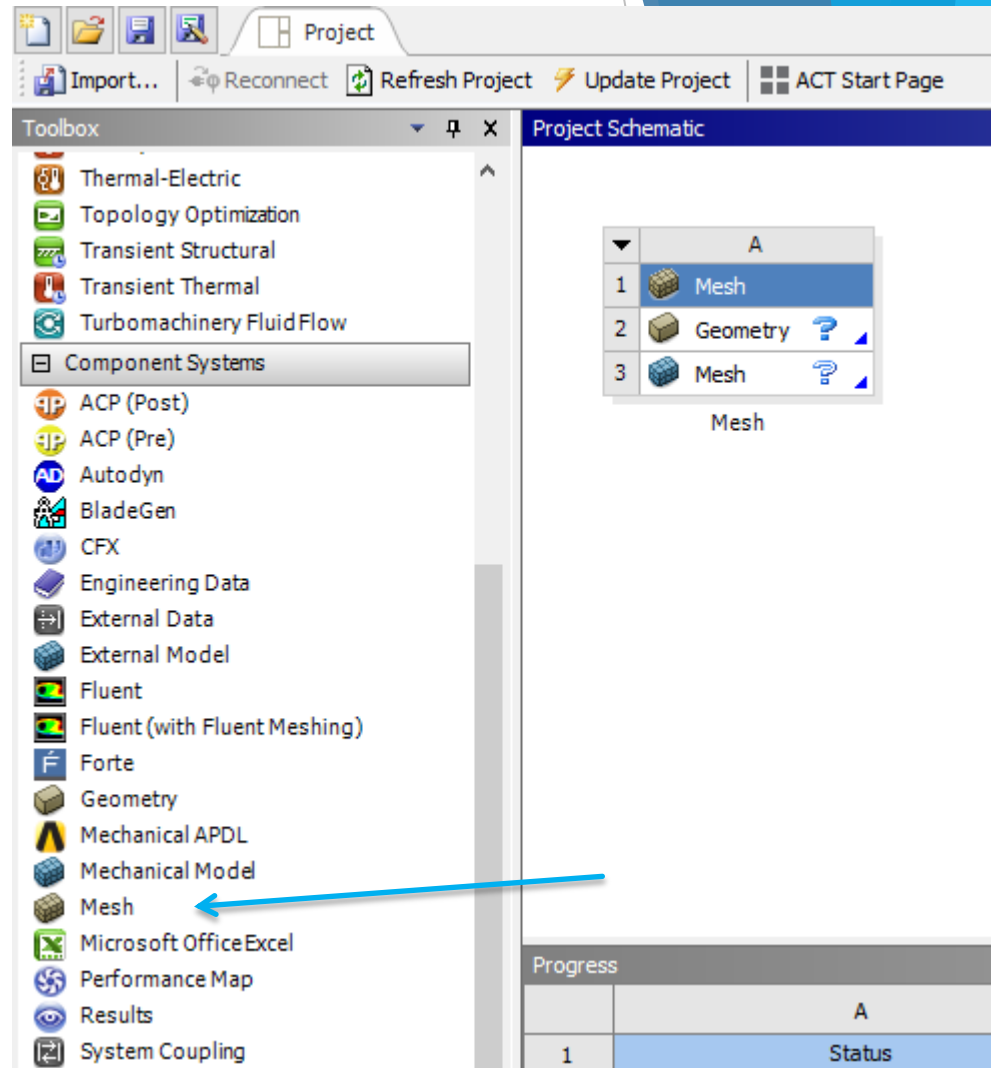
Tratamento dos dados obtidos;

Visualização e interpretação dos resultados.

Descrito a seguir

Pré-Processamento: Geometria

- Abra o ANSYS Workbench
- Crie um projeto arrastando o módulo **Mesh** a partir do Component Systems (árvore da esquerda)

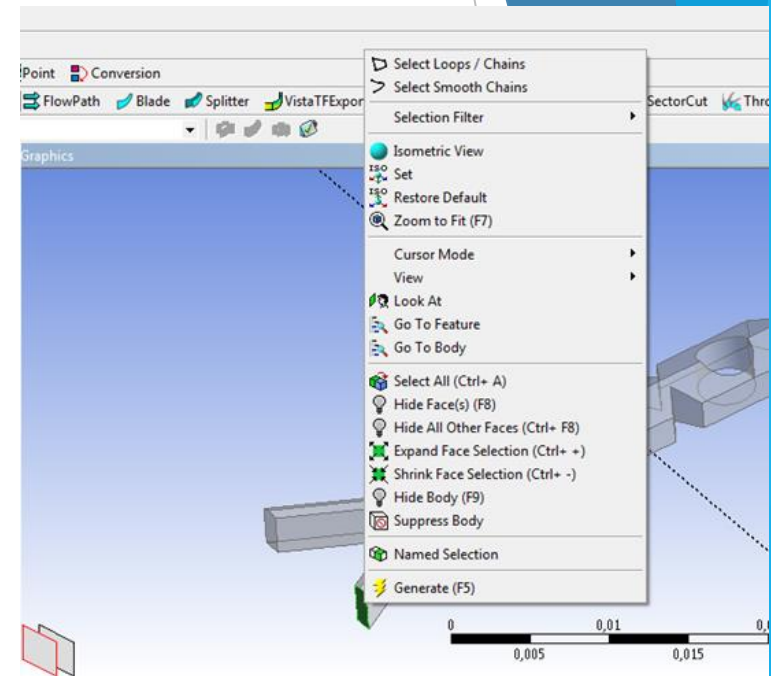


Pré-Processamento: Geometria

- Em Tools > Options > Geometry Import, selecione em Preferred Geometry Editor: DesignModeler, e OK.
- Clique duplo em Geometry para abrir o DesignModeler.
- Importe a geometria do CAD:
 - File > Import External Geometry File, selecionando o arquivo (e.g., no formato .iges, para este exemplo a geometria será a MDB.iges)

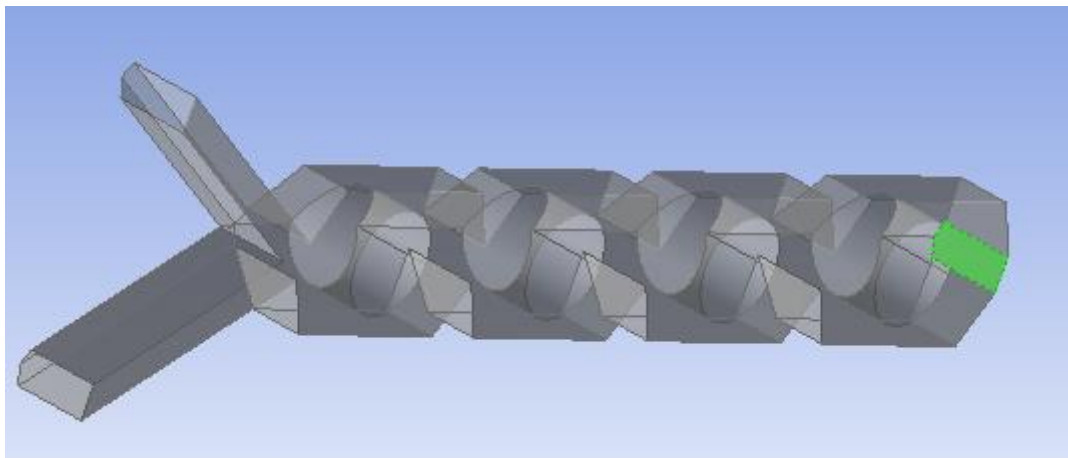
Pré-Processamento: Regiões de Contorno – Entrada 1

- ▶ Botão direito na superfície correspondente ao contorno > Named Selection
- ▶ em Details View insira o nome Inlet-1
- ▶ em Geometry line, clique em Apply.
- ▶ Clique então em Generate



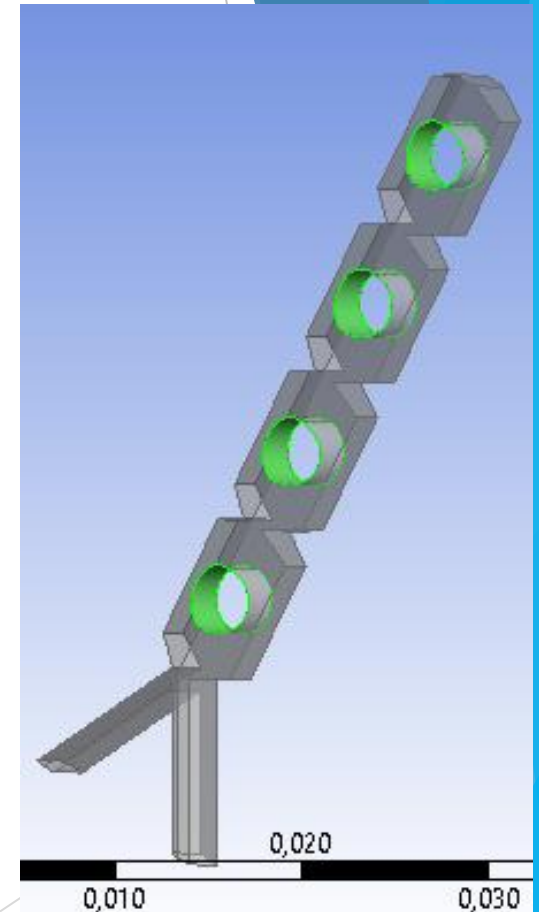
Pré-Processamento: Regiões de Contorno – Entrada 2 e Saída

- Repita o procedimento para a entrada 2, nomeando como Inlet-2
- Repita o procedimento para a saída, nomeando como Outlet (detalhe abaixo)



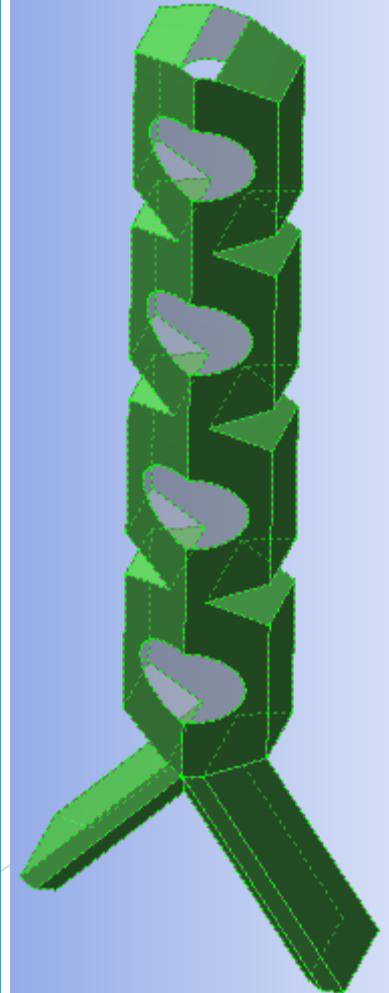
Pré-Processamento: Regiões de Contorno – Paredes Internas

- ▶ Botão direito na superfície correspondente aos contornos, selecionando todas as superfícies (use a tecla shift para múltipla seleção) > Named Selection
- ▶ em Details View insira o nome Circular-Obstacles
- ▶ em Geometry line, clique em Apply.
- ▶ Clique então em Generate

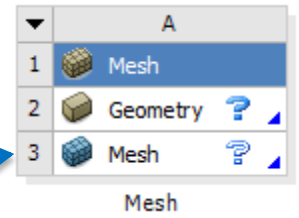


Pré-Processamento: Regiões de Contorno – Paredes do Canal

- ▶ Para facilitar, deixe os contornos já definidos no modo Hide:
 - Clique com botão direito em Inlet-1 na árvore esquerda e Hide Face(s)
 - Repita isto para Inlet-2, Outlet e Circular-Obstacles
 - Usando CTRL+A, selecionando as superfícies remanescentes
 - Clique com o botão direito nestas superfícies > Named Selection.
 - em Details View insira o nome Walls
 - em Geometry line, clique em Apply.
 - Clique então em Generate

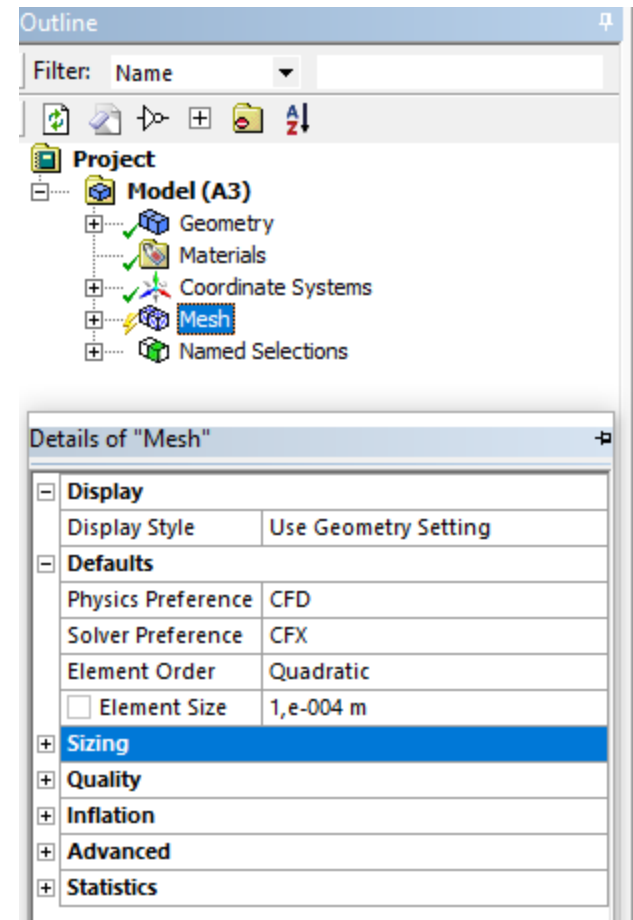


Pré-Processamento: Malha Numérica



- ▶ Clique duplo em **Mesh** para abrir o módulo de geração da malha
- ▶ **PARÂMETROS GLOBAIS:**
- ▶ Clique em Mesh na árvore esquerda.
- ▶ Em Details of “Mesh” defina:
 - Defaults > Physics Preference line > CFD.
 - Defaults > Solver Preference > CFX.
 - Defaults > Element Order > Quadratic.

Diversas outras combinações destes parâmetros são possíveis, sendo as melhores definidas com base na experiência do usuário.

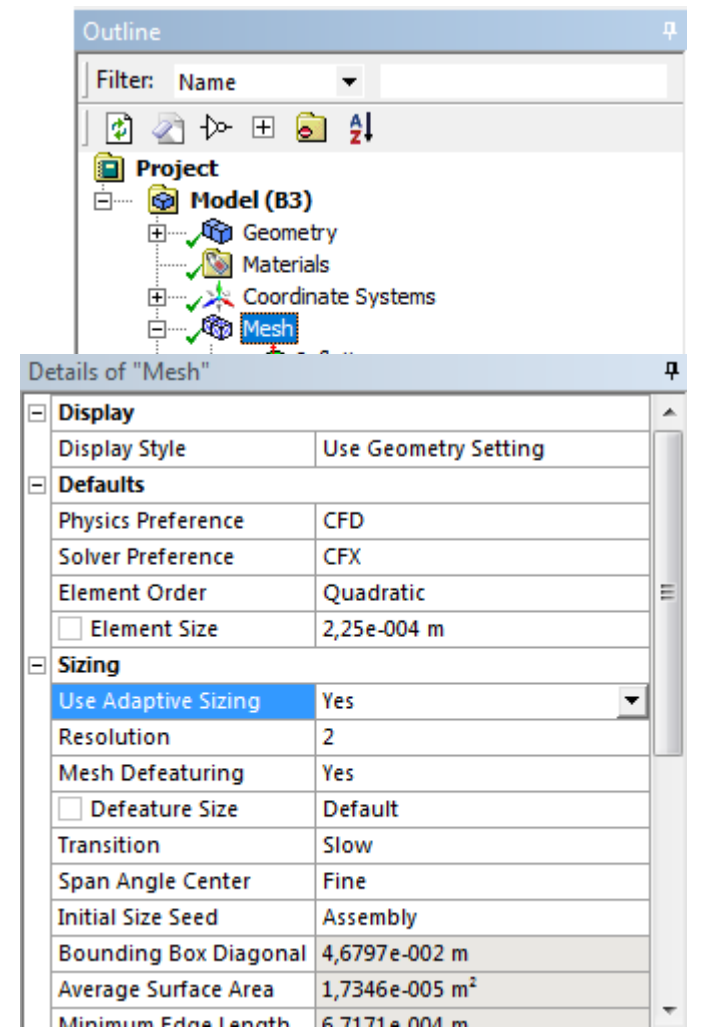


Pré-Processamento: Malha Numérica

▶ PARÂMETROS GLOBAIS:

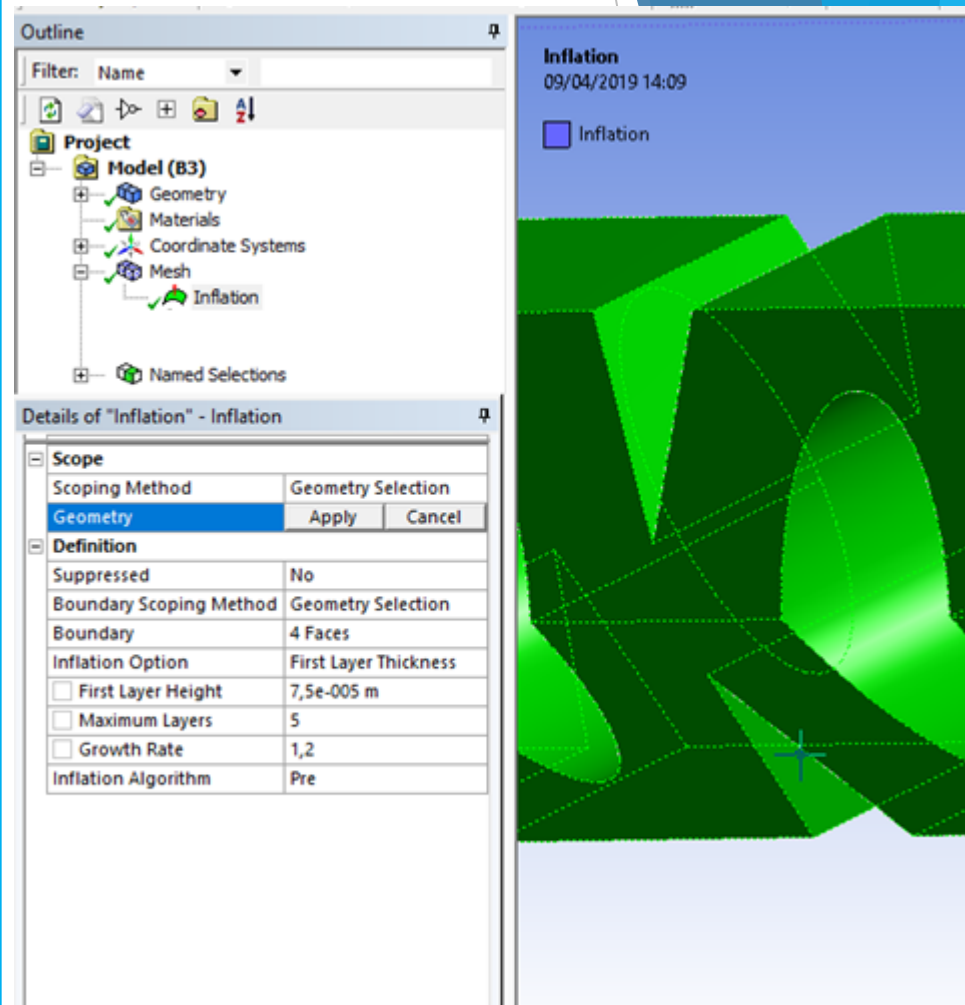
- ▶ Defaults > Element Size: defina 0,00025*
- ▶ Sizing > Use Adaptive Sizing > Yes.
- ▶ Demais parâmetros inalterados.

*Mesh trabalha no SI - unidades podem ser alteradas no menu Units.

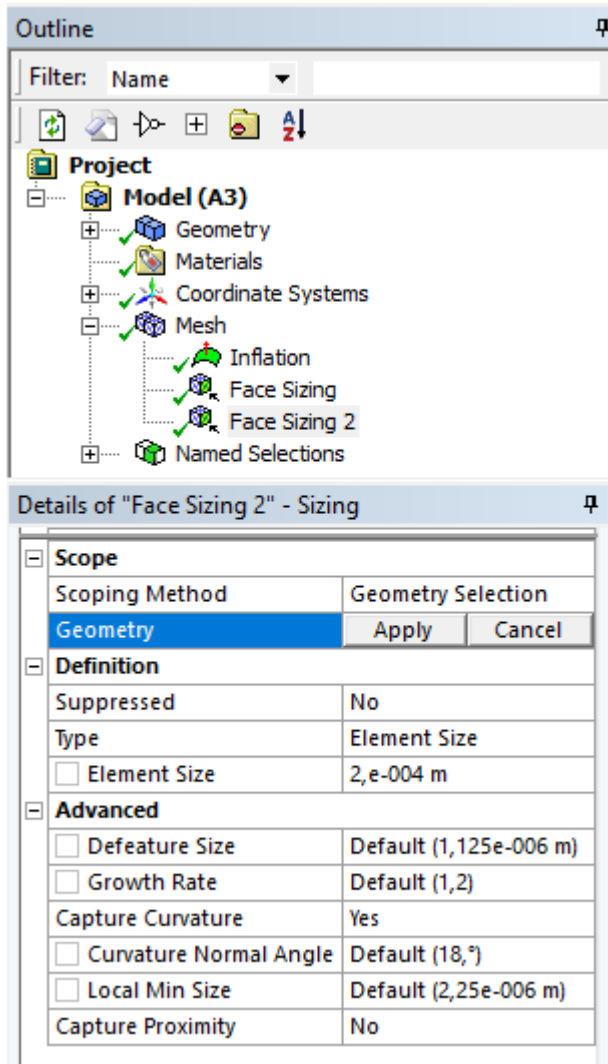


Pré-Processamento: Malha Numérica

- ▶ **PARÂMETROS LOCAIS (PRISMAS AO REDOR DOS OBSTÁCULOS):**
 - ▶ Clique com direito em Mesh > Insert > Inflation.
 - ▶ Na aba Details of Inflation:
 - Selecione a Geometria clicando nela e então em Apply
 - Boundary > selecione as 4 superfícies dos obstáculos circulares > Apply
 - Demais parâmetros conforme a figura ao lado.



Pré-Processamento: Malha Numérica



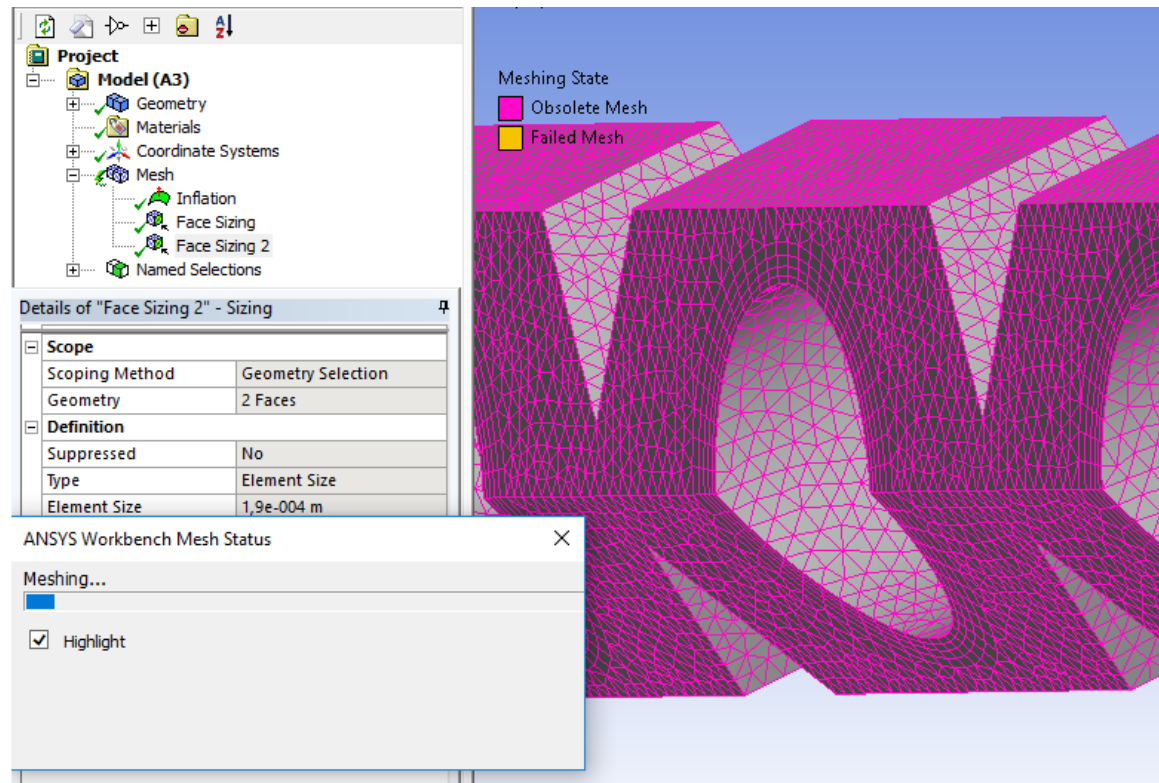
- ▶ **PARÂMETROS LOCAIS (REFINO LOCAL ENTRADAS/SAÍDAS):**
 - ▶ Clique direito em Mesh > Insert > Sizing.
 - ▶ Na aba Details of Face Sizing:
 - ▶ Selecione as superfícies de entrada e saída > Apply.
 - ▶ Definition > Element size > 0,0002
 - ▶ Demais parâmetros inalterados.

Se preferir, pode-se criar vários Face Sizing, cada um para a superfície que se deseja refinar

Pré-Processamento: Malha Numérica

► Gerando a Malha Numérica:

- Clique direito em Generate Mesh (ou Update caso seja uma alteração de parâmetros) - o progresso é mostrado na tela.

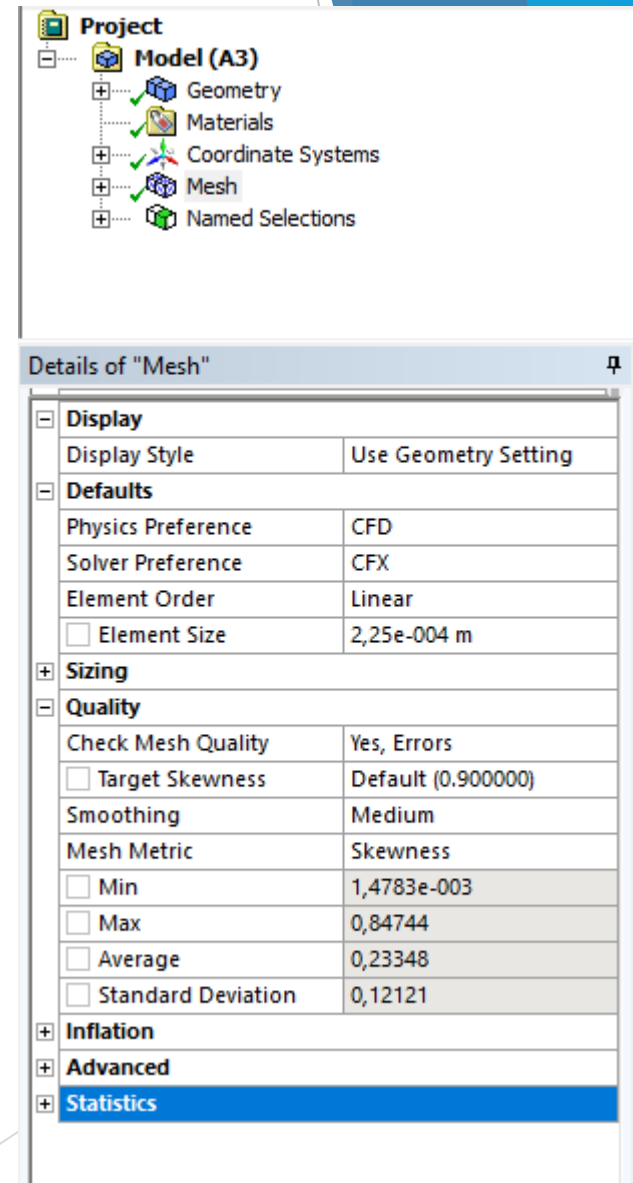


Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

- ▶ Clique em Mesh na árvore esquerda.
- ▶ Details of Mesh > Quality
- ▶ Em Mesh Metric selecione o parâmetro a ser avaliado, como sugestão, avaliaremos três parâmetros:

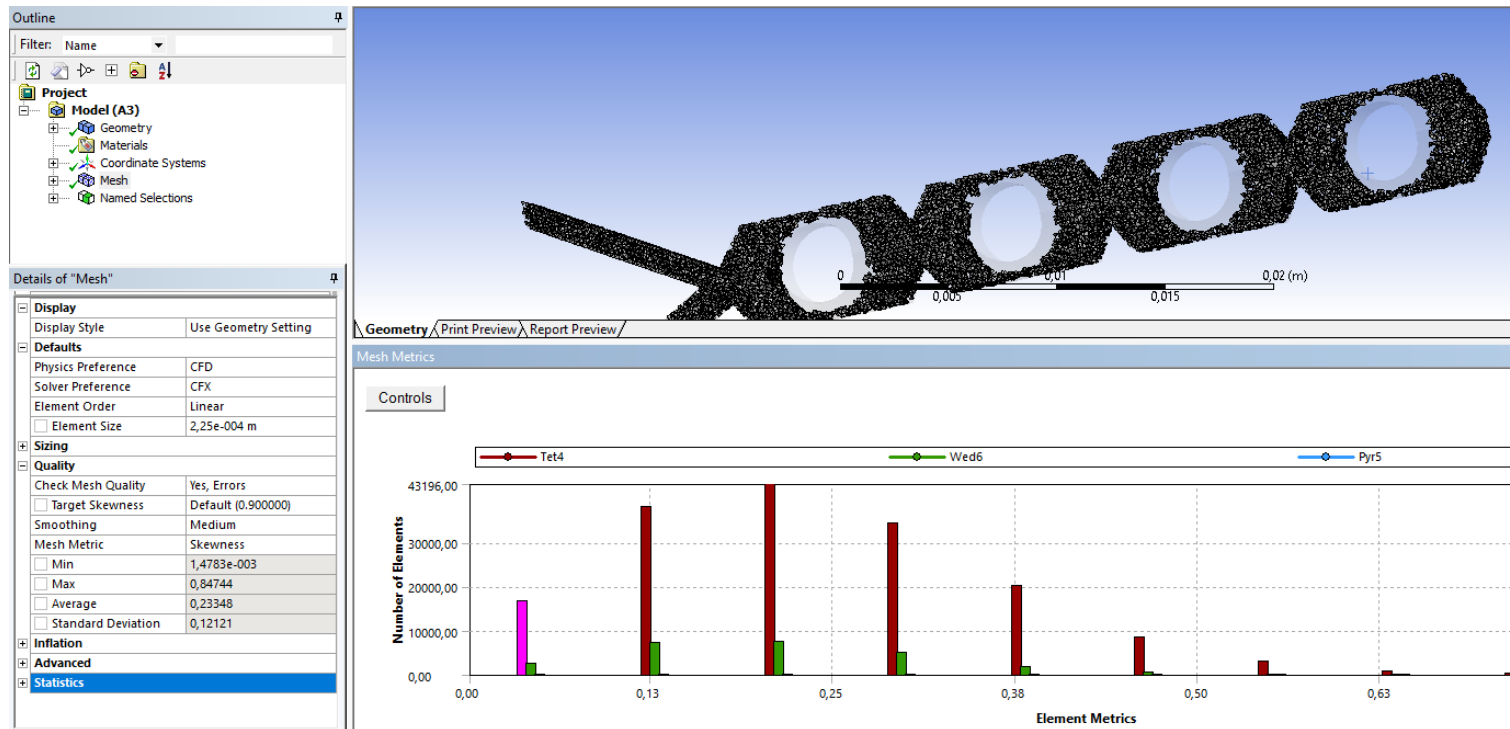
1. Skewness
2. Element Quality
3. Orthogonal Quality

O histograma do parâmetro é exibido.



Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

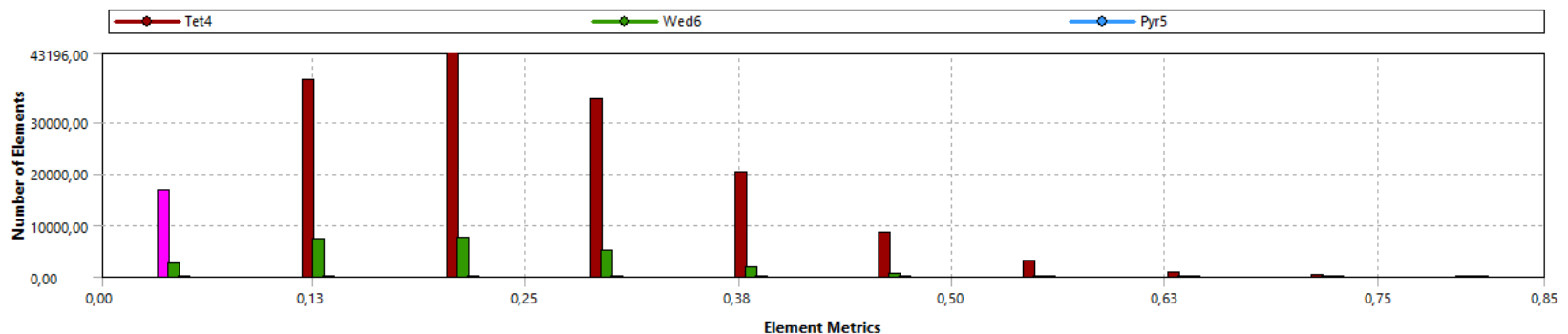
- ▶ Histogramas:
- Clicando em qualquer barra do histograma são exibidos os elementos correspondentes aquela faixa do parâmetro analisado (barra em rosa)



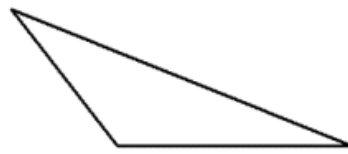
Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

- ▶ Mesh Metric > Skewness:
- Quantifica a proximidade da idealidade de uma face ou célula. Valores entre 0 (elemento equilátero) e 0,5 são recomendados pela Ansys:

Controls



Equilateral Triangle



Highly Skewed Triangle



Equiangular Quad

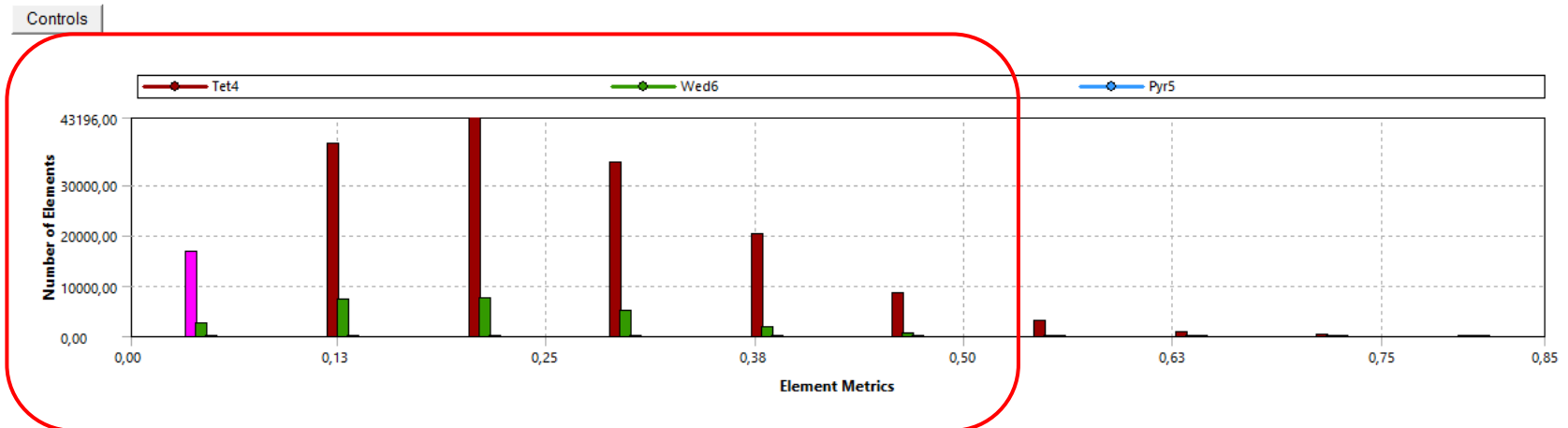


Highly Skewed Quad

Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

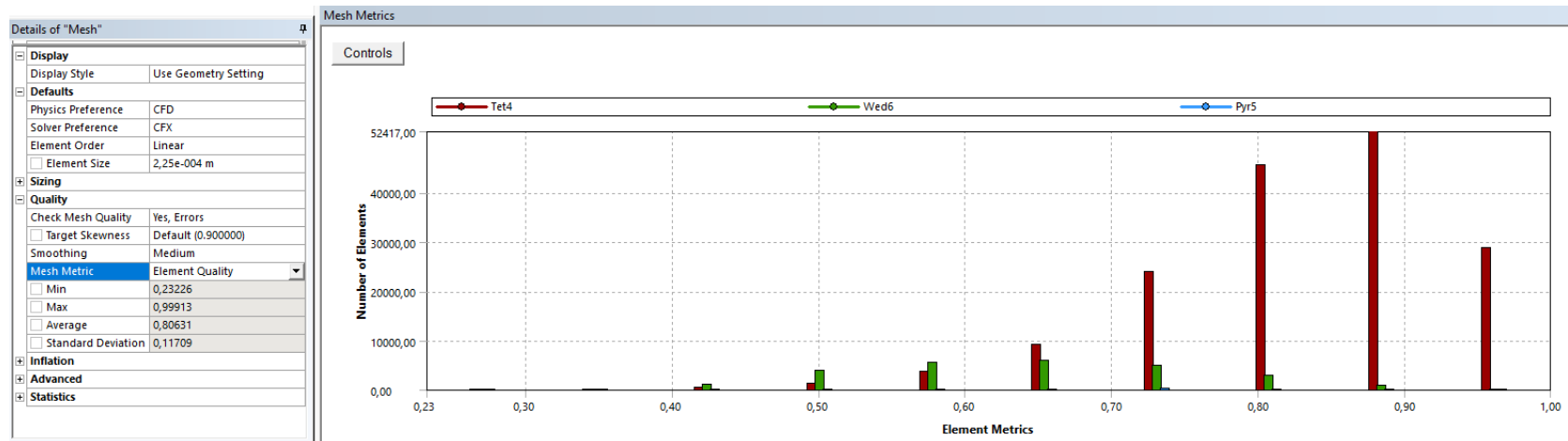
- ▶ Mesh Metric > Skewness:
- ▶ Quantifica a proximidade da idealidade de uma face ou célula. Valores entre 0 (elemento equilátero) e 0,5 são recomendados pela Ansys:

Note que a maior parte dos elementos da malha gerada está abaixo de 0,5 de skewness



Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

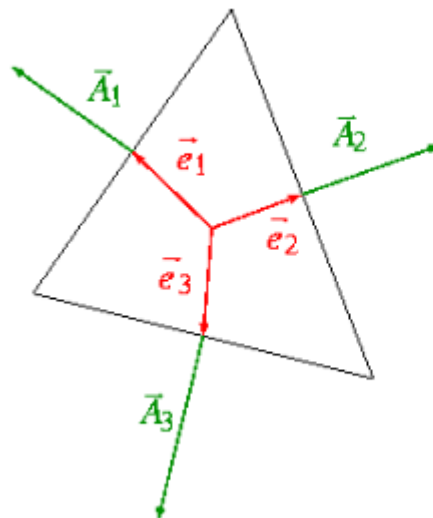
- ▶ Mesh Metric > Element Quality:
- Parâmetro misto que leva em conta a relação entre a área do elemento (2D) ou volume do elemento (3D) com os comprimentos das arestas. Valores próximos de 1 (cubo perfeito) são recomendados.



https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/17.0/en-us/help/wb_msh/msh_Element_Quality_Metric.html

Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

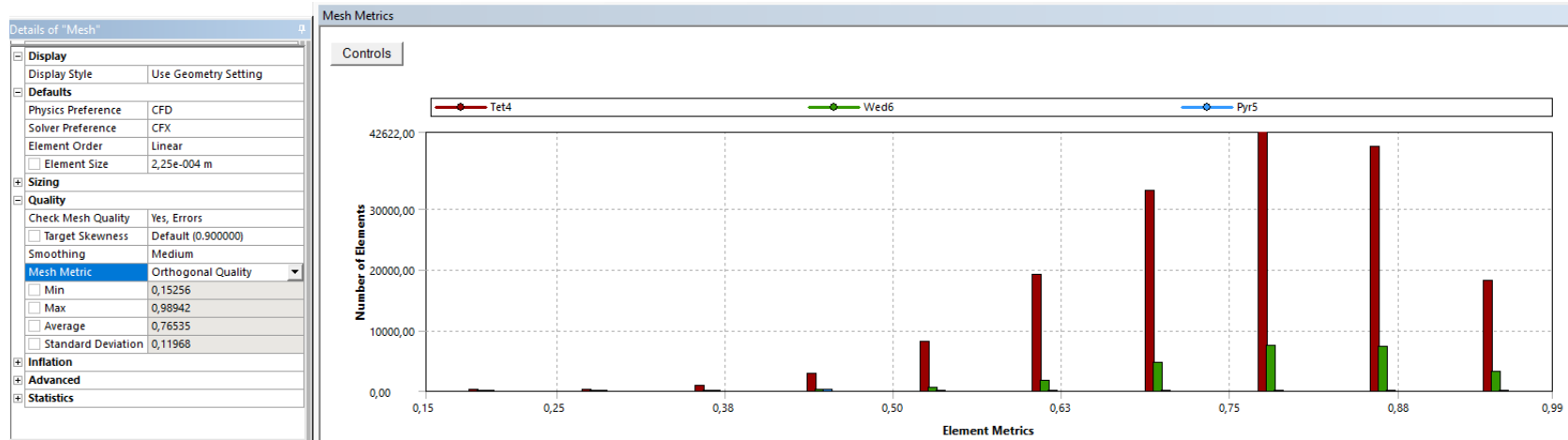
- ▶ Mesh Metric > Orthogonal Quality:
 - Parâmetro que relaciona os vetores normais da face do elemento (vetores \mathbf{A}) com os vetores normais obtidos a partir do centroide do elemento (vetores \mathbf{e}) (ver figura abaixo). Valores próximos de 1 são recomendados.



$$\frac{\vec{A}_i \cdot \vec{e}_i}{|\vec{A}_i| |\vec{e}_i|}$$

Pré-Processamento: Malha Numérica – Qualidade da Malha

- ▶ Mesh Metric > Orthogonal Quality:
- Valores próximos de 1 são recomendados.



A malha gerada apresentou parâmetros de qualidade satisfatórios.

Pré-Processamento: Malha Numérica

- ▶ Exportando o arquivo:
 - File > Export > type > FLUENT input file (*.msh)
 - Então salve o arquivo.

Não utilize acentos, espaços e caracteres especiais no nome do arquivo e nem nas pastas/caminho até onde o arquivo está salvo.

Existem outros formatos de exportação além do .msh

Teste de Independência Numérica



3 ou + malhas com diferentes refinamentos (grids)

Simulação de um caso padrão usando os diferentes grids

Comparação dos resultados (ΔP , perfil de velocidade, etc.)

Refino a partir do qual não se observa diferenças significativas entre os resultados é definido como “independente”, i.e., a discretização não mais influencia o resultado predito.

Casos transientes – independência temporal é analisada pelo número de Courant.

Método GCI (Celik et al., 2008) – quantifica o erro de discretização das malhas usando 3 diferentes refinamentos.

Modelagem Matemática: Caso de estudo 1: mistura entre dois fluidos

Descrição: Mistura entre etanol e óleo de girassol.

Hipóteses:

- ▶ Mistura binária monofásica não-reativa;
- ▶ Mistura entre as espécies é modelada pela difusão mássica e efeitos convectivos do escoamento;
- ▶ Fluido Newtoniano;
- ▶ Escoamento incompressível, isotérmico (25 °C) em regime laminar e estado-estacionário.

Modelagem Matemática: Caso de estudo 1: mistura entre dois fluidos

Com base nas hipóteses, o solver resolverá:

Conservação de massa total (continuidade):

$$\nabla \cdot U = 0$$

Navier-Stokes:

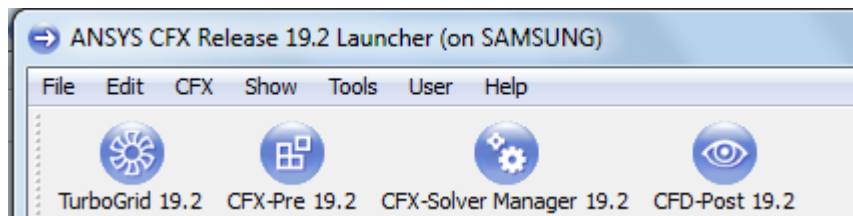
$$\rho(U \cdot \nabla U) = -\nabla p + \mu \nabla^2 U + \rho g$$

Conservação de massa da espécie A/restrrição da fração mássica:

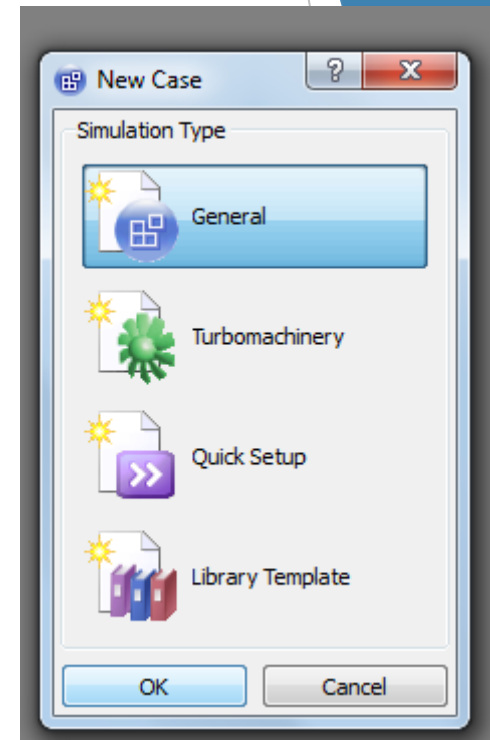
$$\rho(U \cdot \nabla Y_A) = \rho D_{AB} \nabla^2 Y_A \qquad Y_B = 1 - Y_A$$

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

- ▶ Todos os Programas > Ansys 19.2 > Fluid Dynamics > CFX 19.2, o ANSYS CFX Release 19.2 Launcher irá abrir:



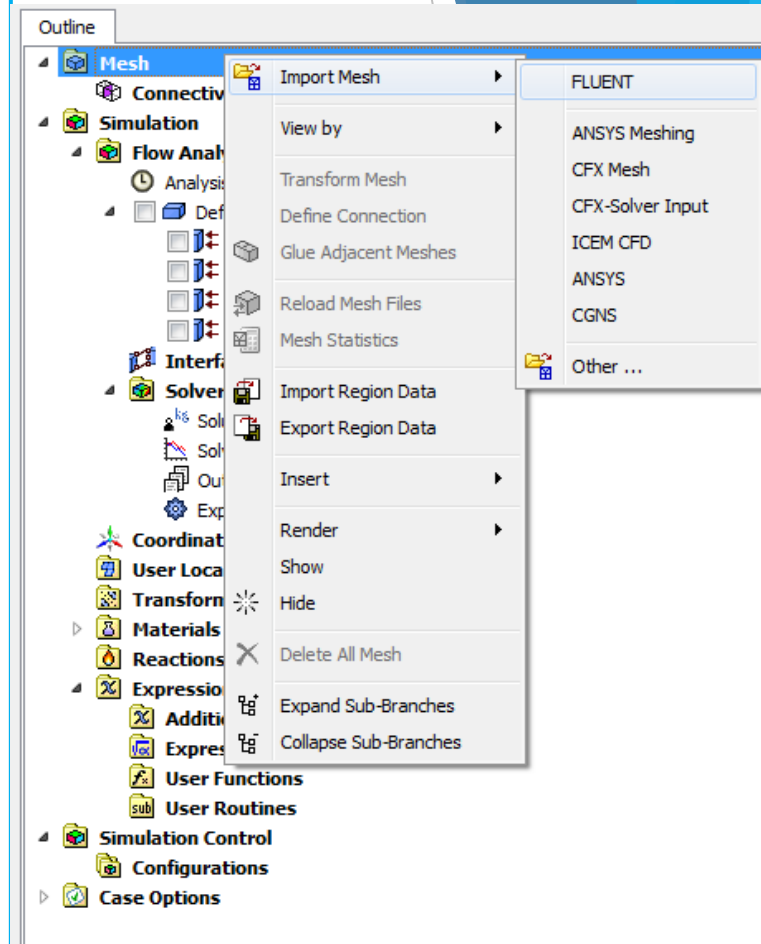
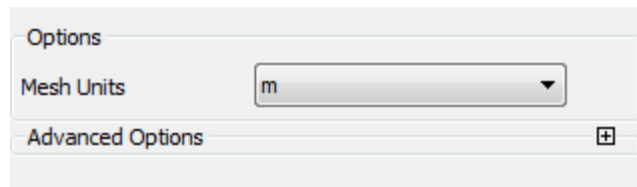
- ▶ Clique no CFX-Pre 19.2
- ▶ File > New Case > General > OK



Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

- Importe a malha, clicando com o direito em Mesh > Import Mesh > FLUENT (.msh)

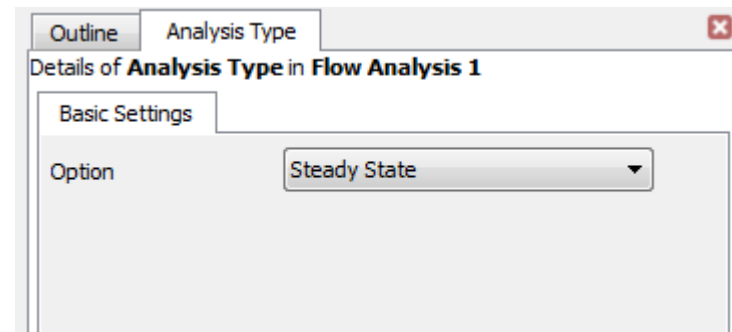
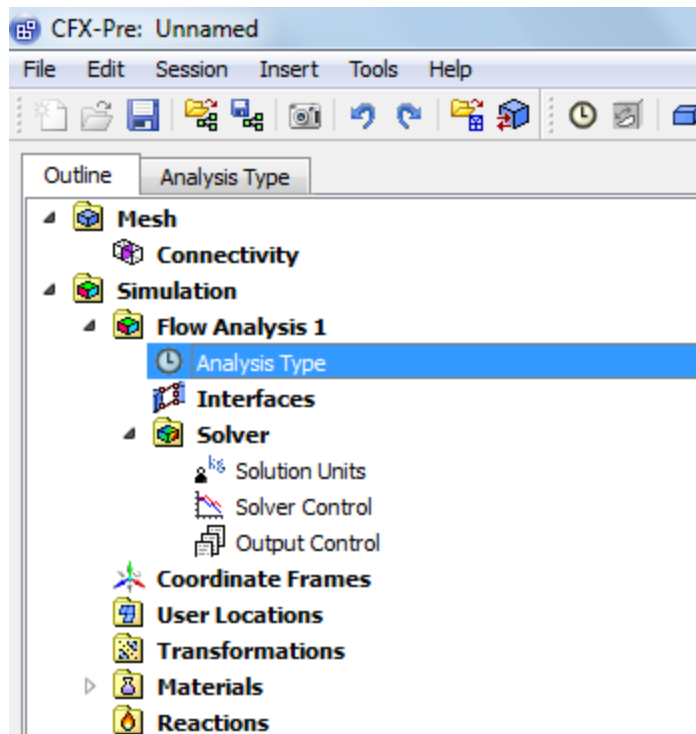
Confira as unidades de comprimento na janela de seleção do arquivo (para o exemplo, em metros).



Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

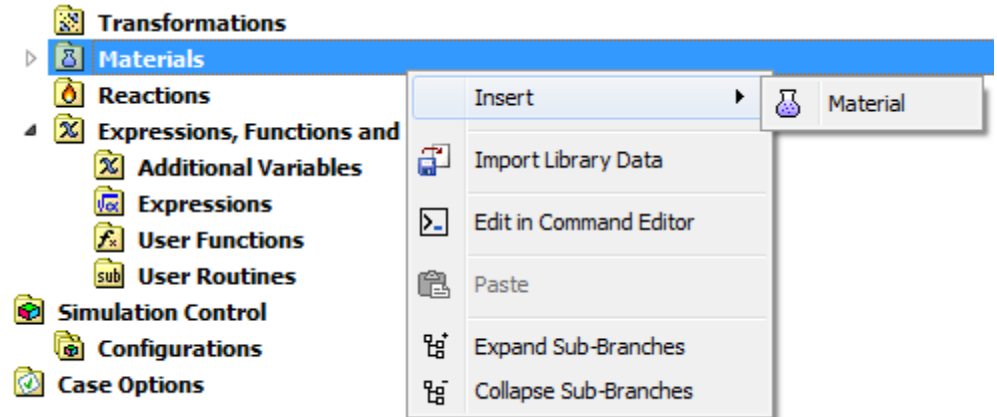
- ▶ Definição do tipo de caso (estacionário):
- ▶ Analysis Type > Steady State.

**Sempre clique duplo
para abrir as abas!**



Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

► Definição do sistema:



► Criando o Óleo:

- Clique com o direito em Materials > Insert > Material
- Name: Sunflower Oil.
- Aba Basic Setting: Option > Pure Substance,
- Clique na caixa Thermodynamic State > selecione Liquid.

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

► Definindo as propriedades do Óleo:

► Aba Material Properties:

▪ Thermodynamic Properties:

Molar Mass: 879.23 kg kmol⁻¹

Density: 914.96 kg m⁻³

▪ Transport properties: (clique no +)

Dynamic viscosity: 0.0549 Pa s⁻¹

Outline Material: Sunflower oil

Details of **Sunflower oil**

Basic Settings Material Properties

Option General Material

Thermodynamic Properties

Equation of State

Option Value

Molar Mass 870.91 [g mol⁻¹]

Density 914.96 [kg m⁻³]

☒ Specific Heat Capacity

Option Value

Specific Heat Capacity 2257 [J kg⁻¹ K⁻¹]

Specific Heat Type Constant Pressure

☐ Reference State

Transport Properties

☒ Dynamic Viscosity

Option Value

Dynamic Viscosity 0.0549 [Pa s]

☐ Thermal Conductivity

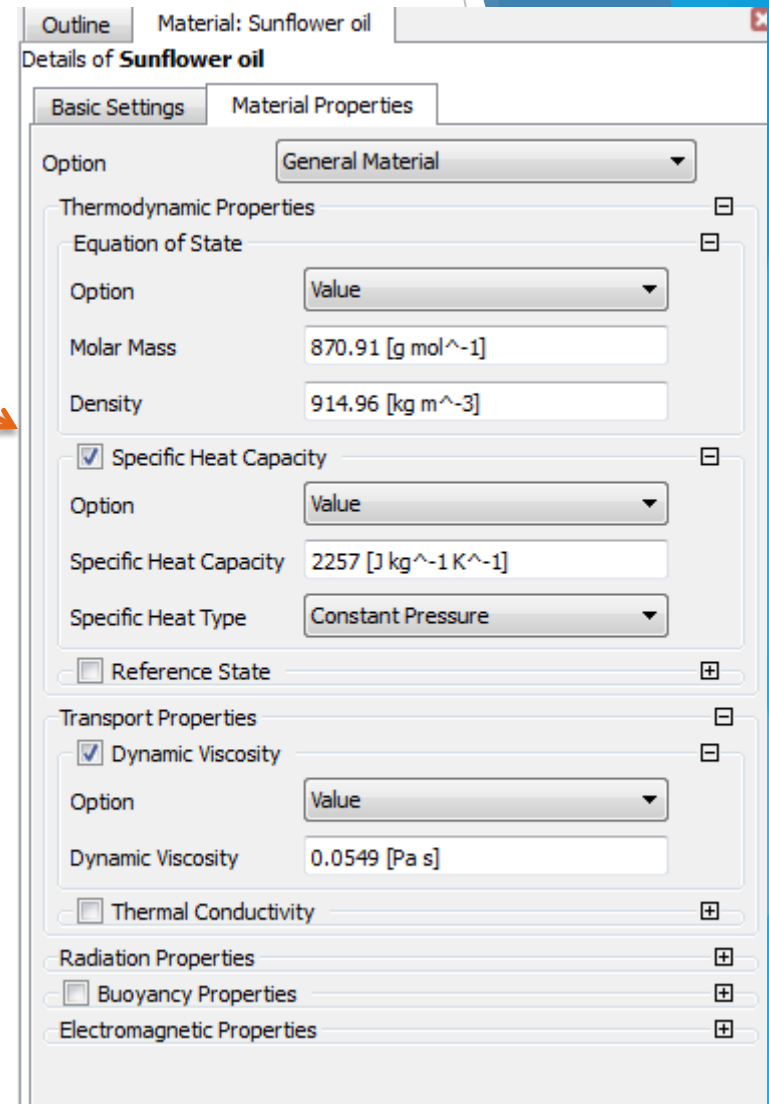
Radiation Properties

☐ Buoyancy Properties

Electromagnetic Properties

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

Obs.: O valor do *Specific Heat Capacity* (C_p) é usado para determinar a entalpia, mesmo em casos isotérmicos, sendo requerido pelo CFX (ex. use o C_p da água caso não tenho o valor real do fluido)



Material: Sunflower oil

Details of **Sunflower oil**

Basic Settings | Material Properties

Option: General Material

Thermodynamic Properties

Equation of State

Option	Value
Molar Mass	870.91 [g mol ⁻¹]
Density	914.96 [kg m ⁻³]

☒ Specific Heat Capacity

Option	Value
Specific Heat Capacity	2257 [J kg ⁻¹ K ⁻¹]
Specific Heat Type	Constant Pressure

☐ Reference State

Transport Properties

☒ Dynamic Viscosity

Option	Value
Dynamic Viscosity	0.0549 [Pa s]

☐ Thermal Conductivity

Radiation Properties

☐ Buoyancy Properties

Electromagnetic Properties

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

▶ Importando o Etanol:

- Clique com o direito em Materials > Import Library Data > Liquid Phase Combustion
 - Selecione C₂H₆O > OK
- ▶ As propriedades termodinâmicas e de transporte estão a 25 °C

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

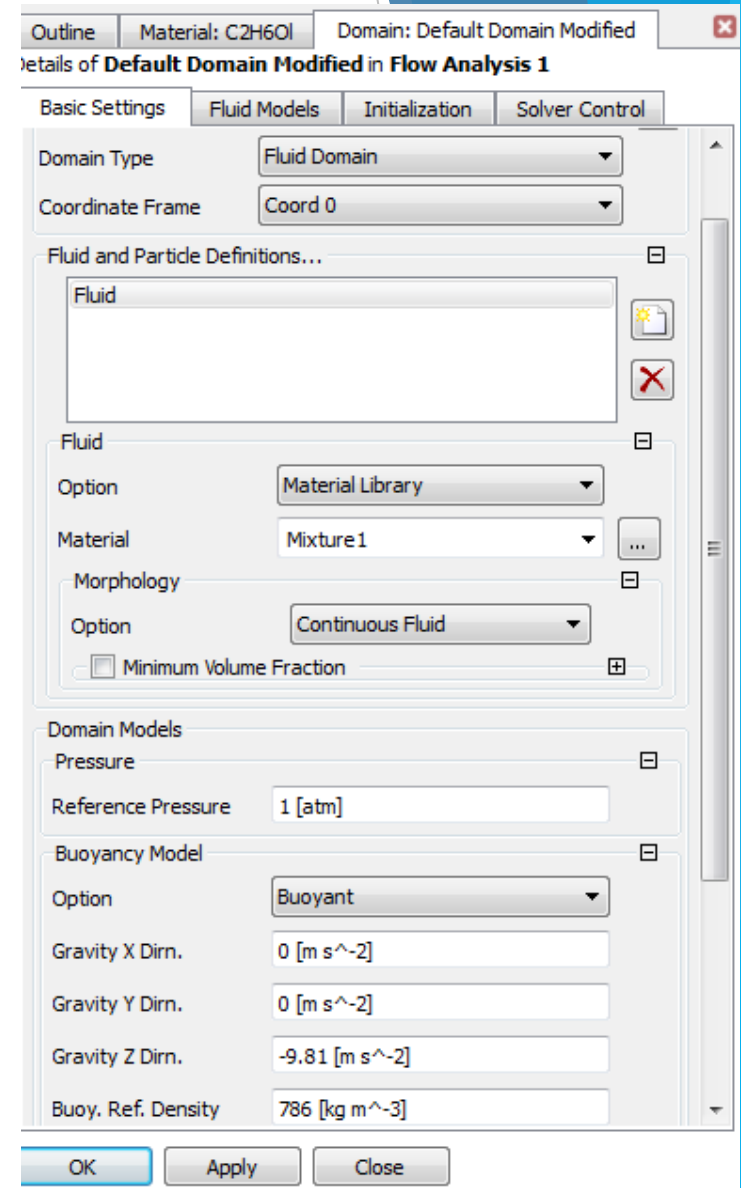
► Criando a mistura binária:

- Clique com o direito em Materials > Insert Materials
- Name: Mixture1
- Aba Basic Setting > Option > Variable Composition Mixture
- Clique na caixa Thermodynamic State > Liquid.
- Material List: selecione Sunflower Oil and C₂H₆OI.

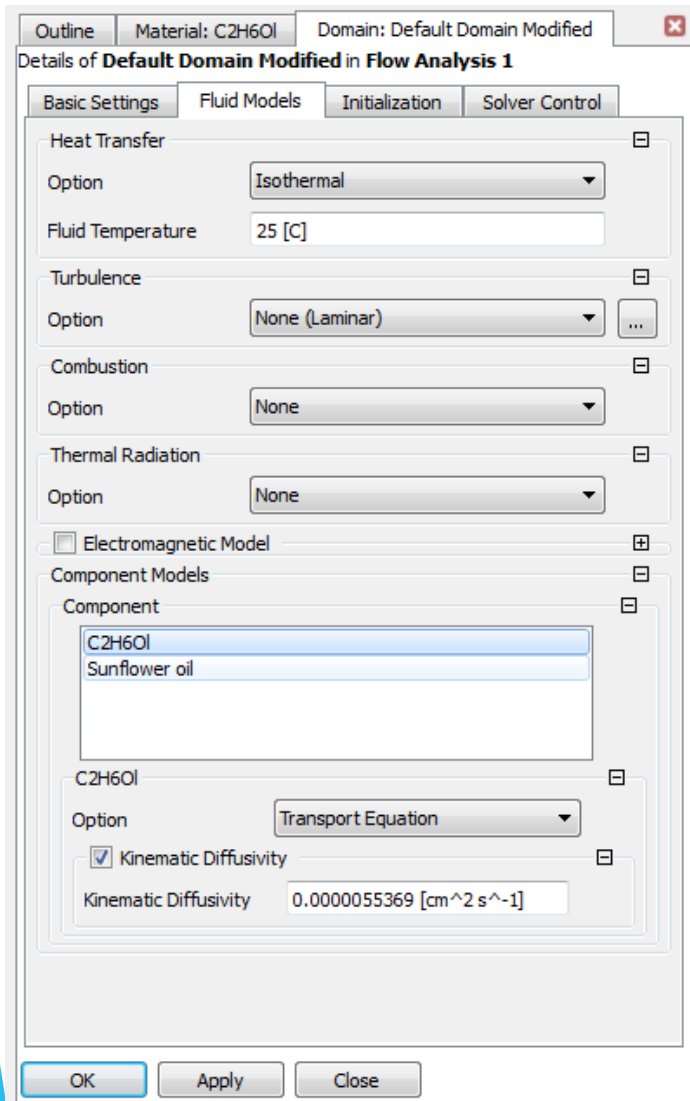
Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

► Demais definições globais do caso:

- Default Domain > Aba Basic Settings:
- Fluid and Particle Definitions > Material: selecione Mixture1 como Continuous Fluid.
- Buoyancy Model > Buoyant: defina o eixo de atuação da gravidade e a densidade de referência (e.g., etanol = 786 kg m^{-3}).
- Demais parâmetros inalterados



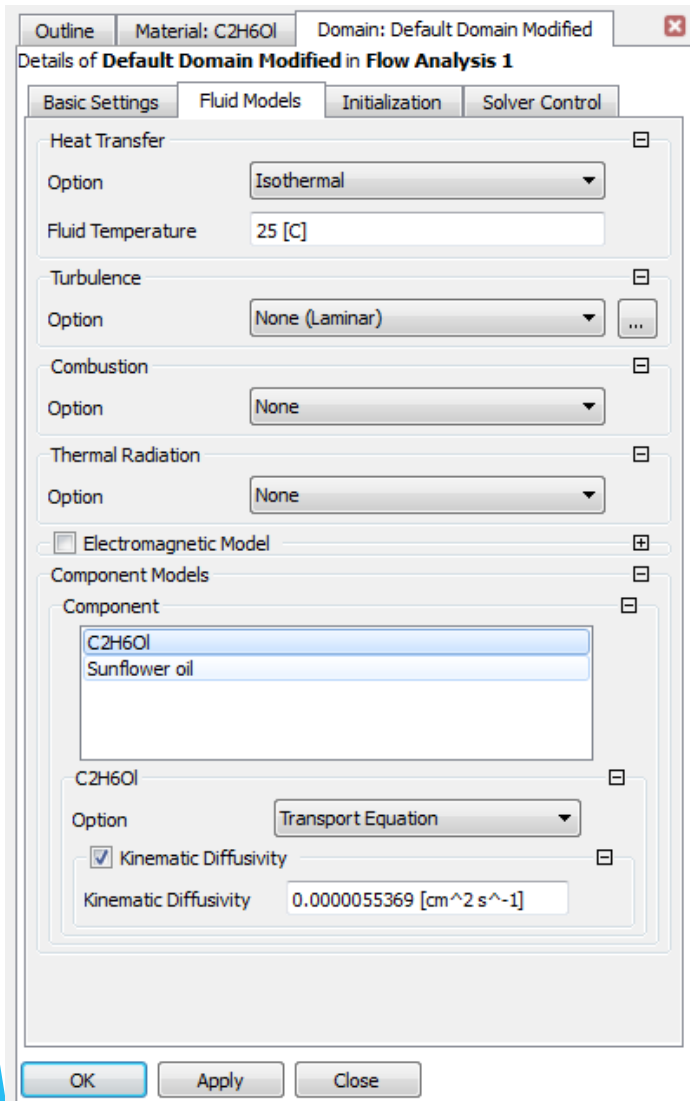
Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos



► Demais definições globais do caso:

- Default Domain, aba Fluid Models:
- Heat Transfer > Isothermal > 25 °C
- Turbulence > None (Laminar).

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos



► Demais definições globais do caso:

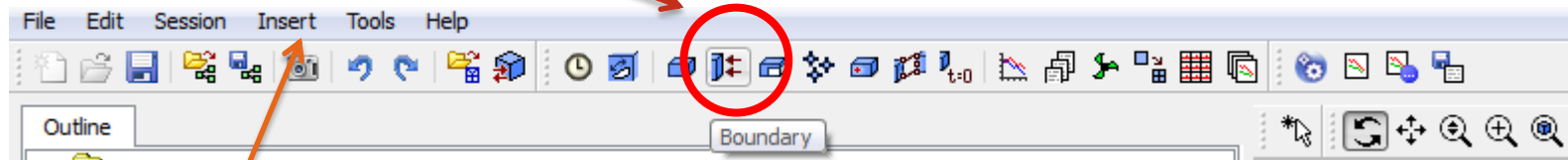
- Component Models > Transport Equation para C2H6Ol, clique na caixa Kinematic Diffusivity e o valor $(5.5369e-06 \text{ cm}^2/\text{s})^*$
- Component Models > Constraint para Sunflower Oil.
- Demais parâmetros inalterados.

* Valores previamente determinado etanol-óleo

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

- ▶ As condições de contorno são criadas em:

- ▶ Ícone Boundary



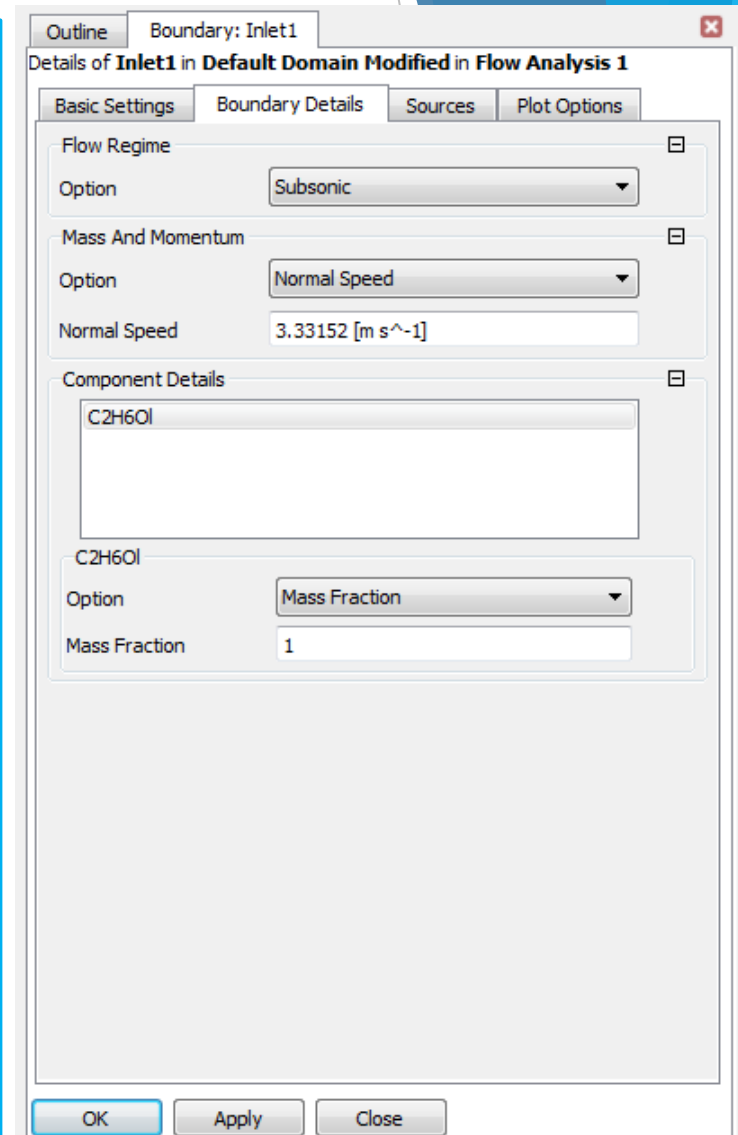
- ▶ ou Insert > Boundary no menu superior

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

▶ Entrada de etanol puro:

- Insert > Boundary > Name: Inlet1
- Aba Basic Setting:
- Boundary Type > Inlet Location
selecione a superfície correspondente (inlet 1).
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > Normal Speed > valor prescrito conforme n° de Reynolds (e.g. 3.33152 m/s).
- Component Details > C2H6OI Mass Fraction = 1 (etanol puro)*

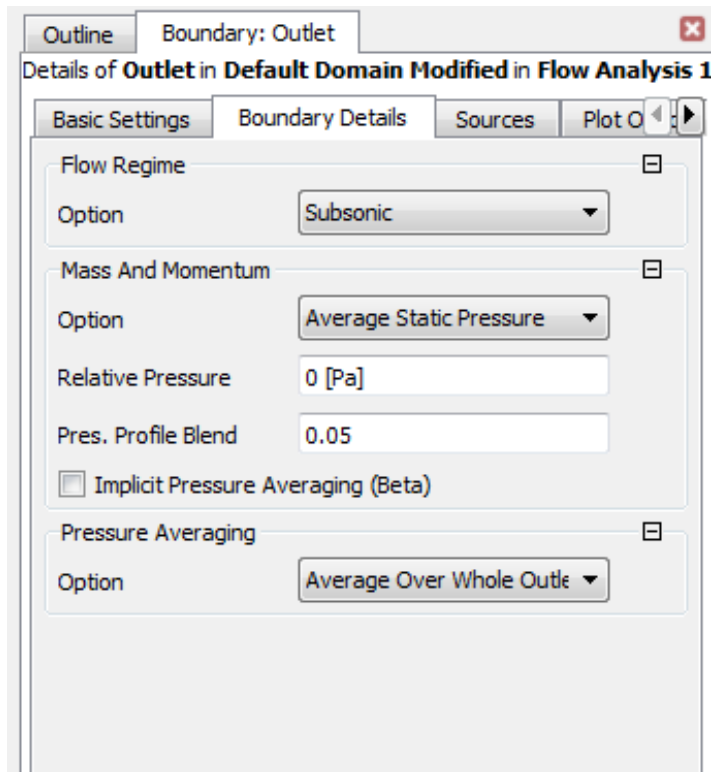
* Como o óleo é *constraint*, sua fração é definida por (1 – fração mássica do etanol)



Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

- ▶ Entrada de óleo de girassol puro:
 - Insert > Boundary > Name: Inlet2
 - Aba Basic Setting:
 - Boundary Type > Inlet Location selecione a superfície correspondente (inlet 2).
 - Aba Boundary Details:
 - Mass and Momentum > Normal Speed > valor prescrito conforme n° de Reynolds (e.g. 3.33152 m/s).
 - Component Details > C2H6OI Mass Fraction = 0 (óleo puro)

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos



► Saída:

- Insert > Boundary > Name: Outlet
- Aba Basic Setting:
- Boundary Type > Inlet Location
selecione a superfície correspondente (outlet).
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > Average Static Pressure.
- Relativa Pressure = 0 (descarrega para atmosfera)

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

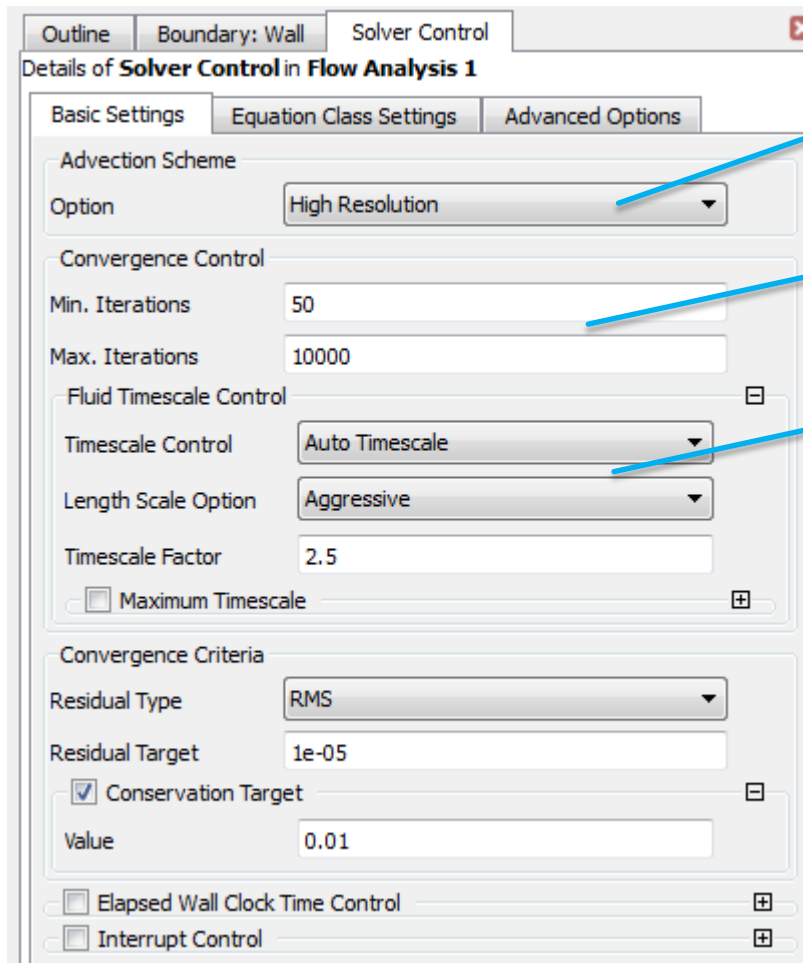
► Paredes:

- Insert > Boundary > Name: Wall
- Aba Basic Setting:
- Boundary Type > Inlet Location selecione a superfície correspondente (walls).
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > No Slip Wall

(condição de não-deslizamento nas paredes)

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

► Detalhes numéricos: Duplo clique em Solver Control



Esquema de discretização de alta ordem

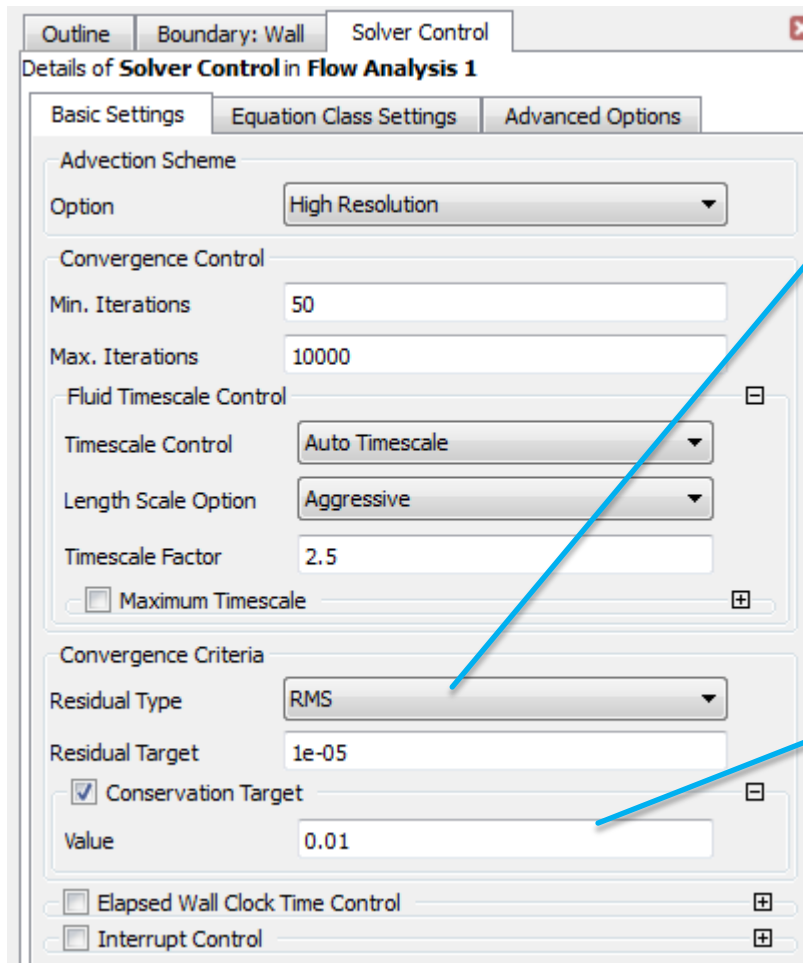
Faixa de iterações da solução, e.g. pelo menos 50

Tipo de avanço da solução, agressivo (tende a convergir mais rápido), com fator de aumento de 2.5*

* O Timescale Factor, bem como os outros parâmetros podem variar conforme a simulação, sendo os mais adequados definidos com base na experiência em simulações e o comportamento da solução destas

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

► Detalhes numéricos: Duplo clique em Solver Control



RMS: Resíduo médio quadrático, quantifica o imbalance* local da propriedade transportada no escoamento, serve como parâmetro de monitoramento de convergência da solução.

$RMS = 10^{-5}$ provê previsões acuradas.

Conservation target: “Imbalance” global permitido (e.g. 0.01 = 1%)

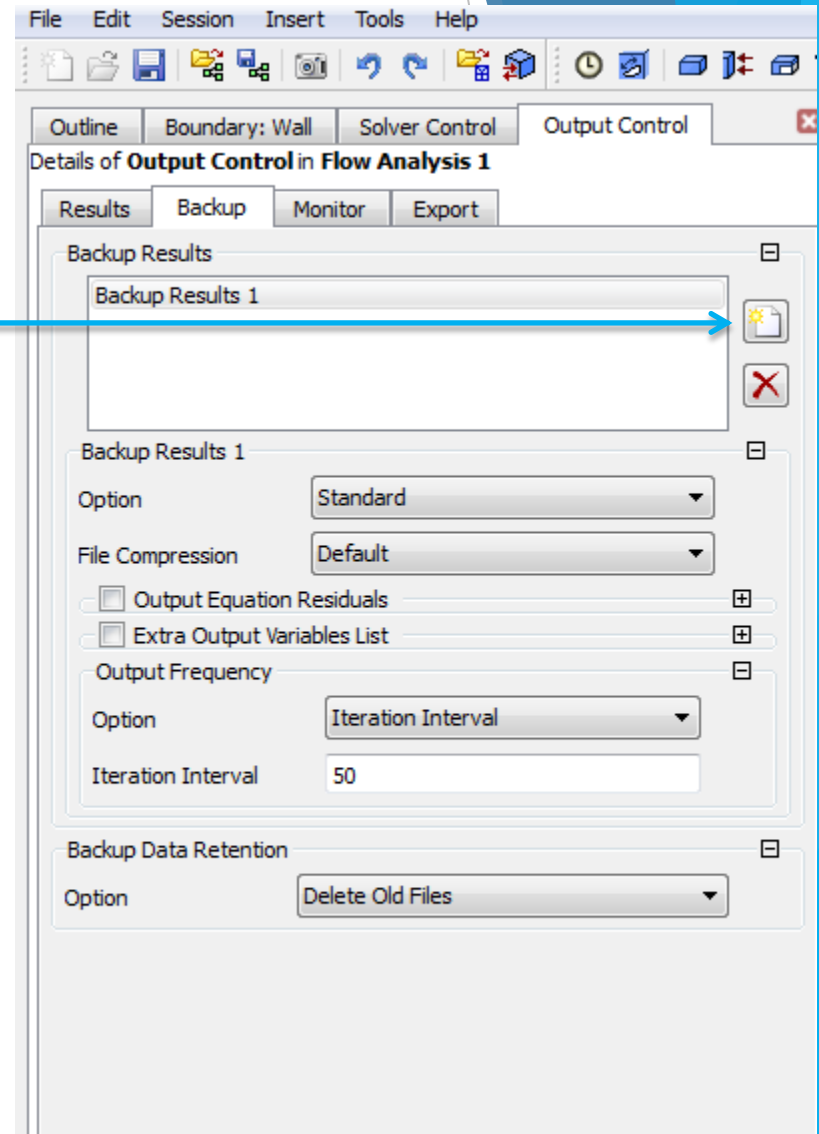
* Imbalance: “desvio” da conservação da propriedade transportada

Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

► Detalhes numéricos:

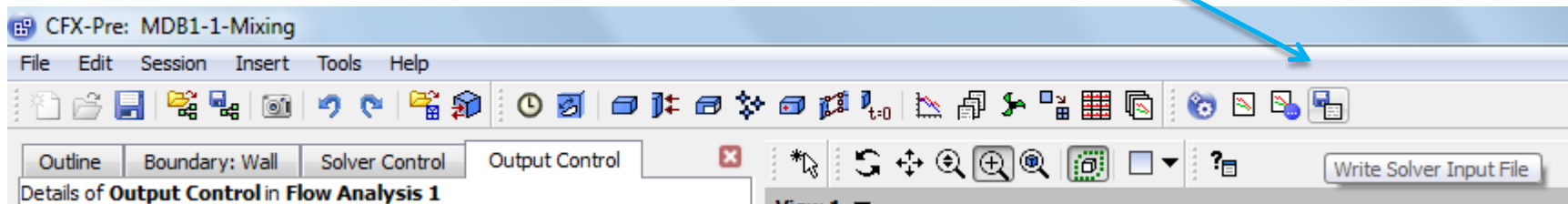
- Duplo clique em Output Control
- Aba Backup > Add New Item
- Defina o intervalo para Backup igual a 50, com opção Delete Old Files

Isto é, a simulação fará um Backup a cada 50 iterações, deletando sempre o arquivo anterior (minimiza o espaço ocupado no HD)



Modelagem Matemática: Setup Caso 1: mistura entre dois fluidos

- ▶ **Salva o arquivo de definição (.def):**
- ▶ No ícone Write Solver Input File

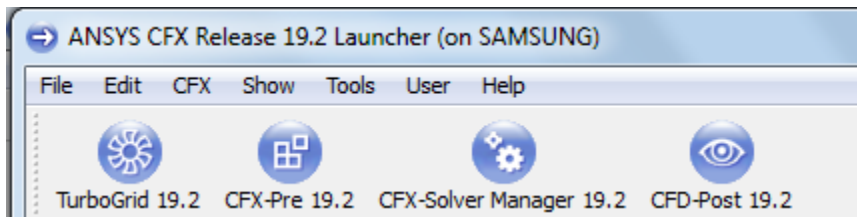


- ▶ Salve o arquivo .def na pasta desejada (ex. MDB-1Mix.def).

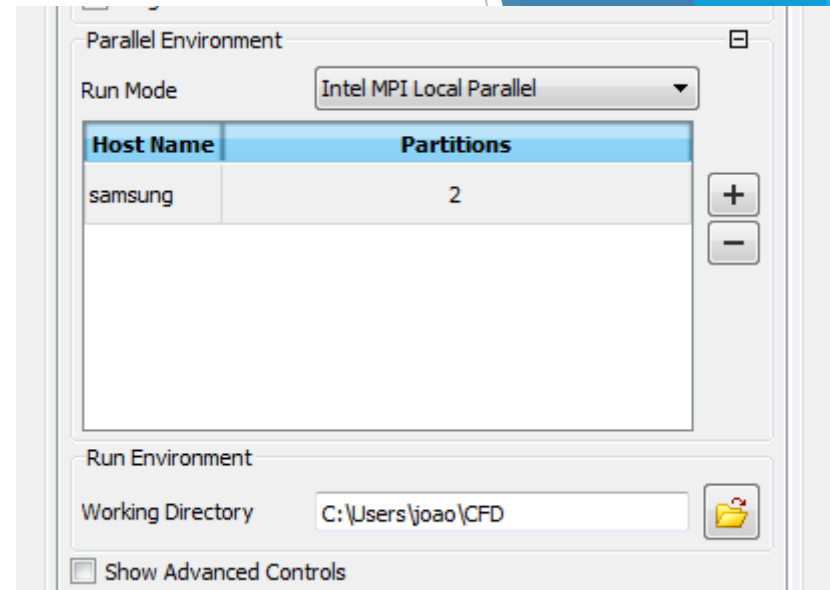
Não utilize acentos, espaços e caracteres especiais no nome do arquivo e nem nas pastas/caminho até onde o arquivo está salvo.

Processamento (Solver)

- ▶ Abra o CFX-Solver Manager 19.2, pelo launcher:



- ▶ File > Define Run
- ▶ Em Solver Input File, abra o .def salvo anteriormente (MDB-1Mix.def)
- ▶ Parallel Environment > Run mode > Intel MPI Local Parallel:
Partitions = 2
- ▶ Em Working Directory define-se onde os dados serão salvos



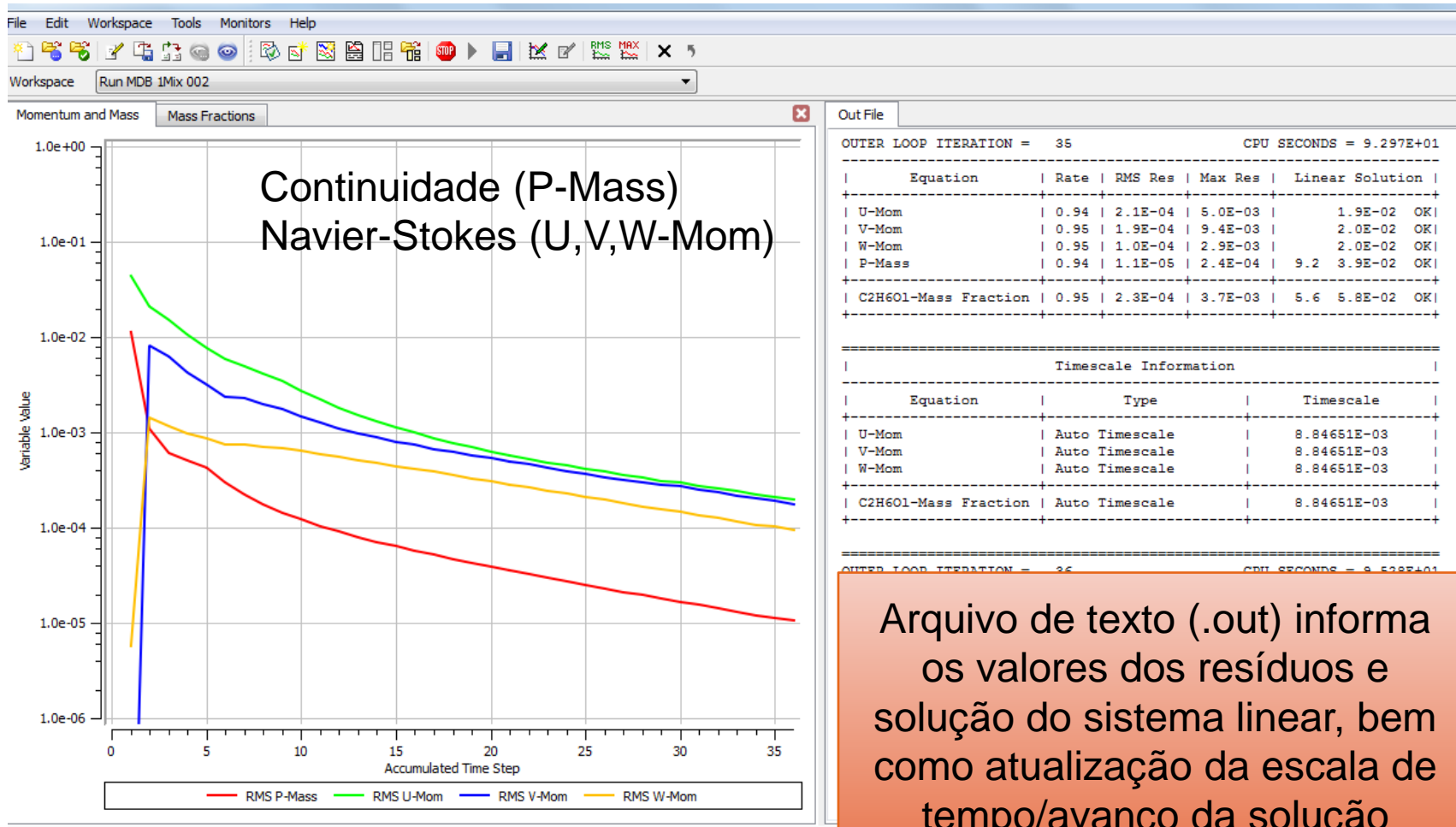
Desta forma, a simulação irá rodar particionada em 2 processadores (mais partições podem ser adicionadas conforme a configuração do hardware usado)

Processamento (*Solver*)

- ▶ Clicando em Start Run a simulação será iniciada.
- No local onde os dados serão salvos, uma pasta com nome:
- MDB1-Mix_001.dir é criada, contendo os arquivos temporários da simulação.

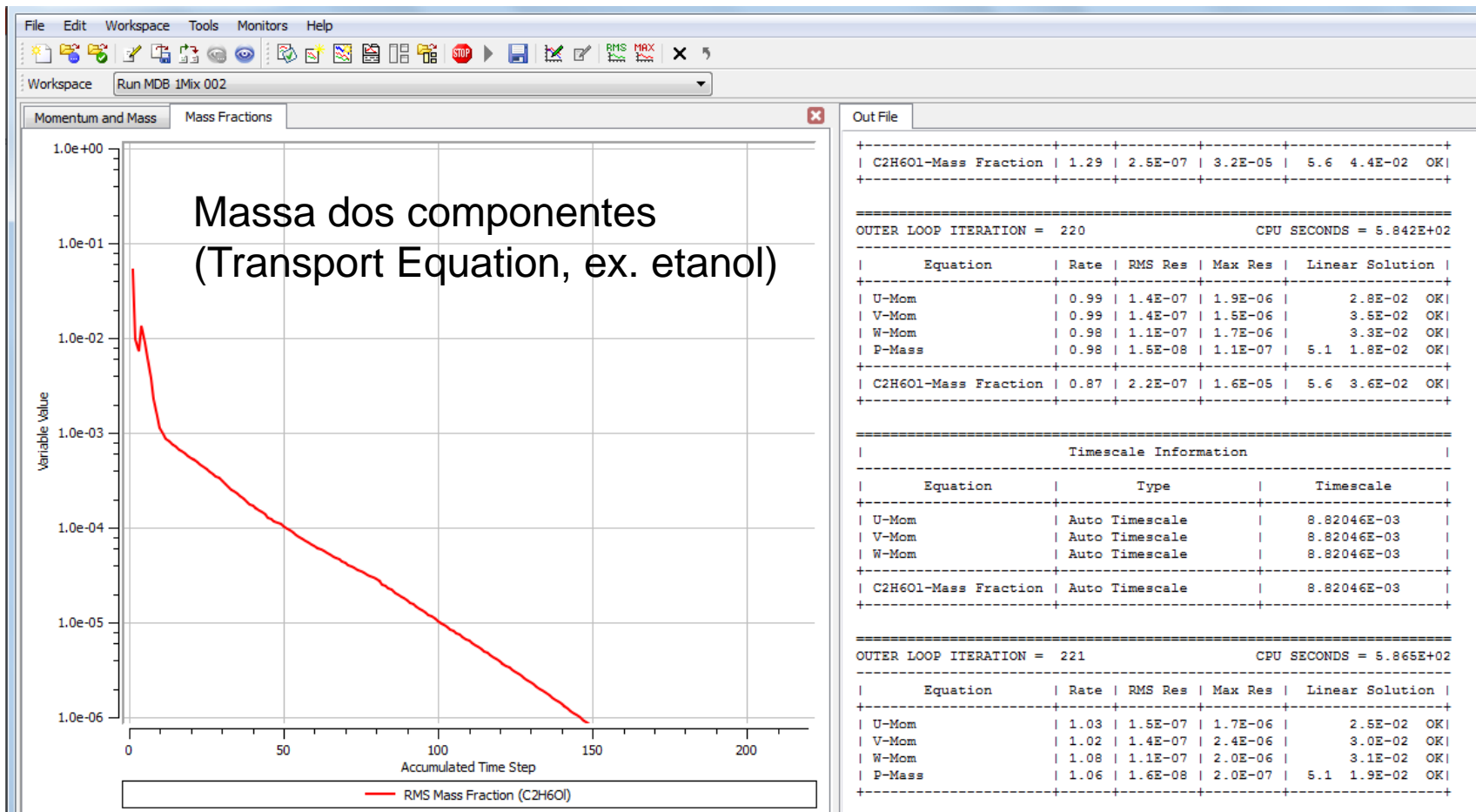
Processamento (Solver)

- ▶ O solver plota então o gráfico dos resíduos:



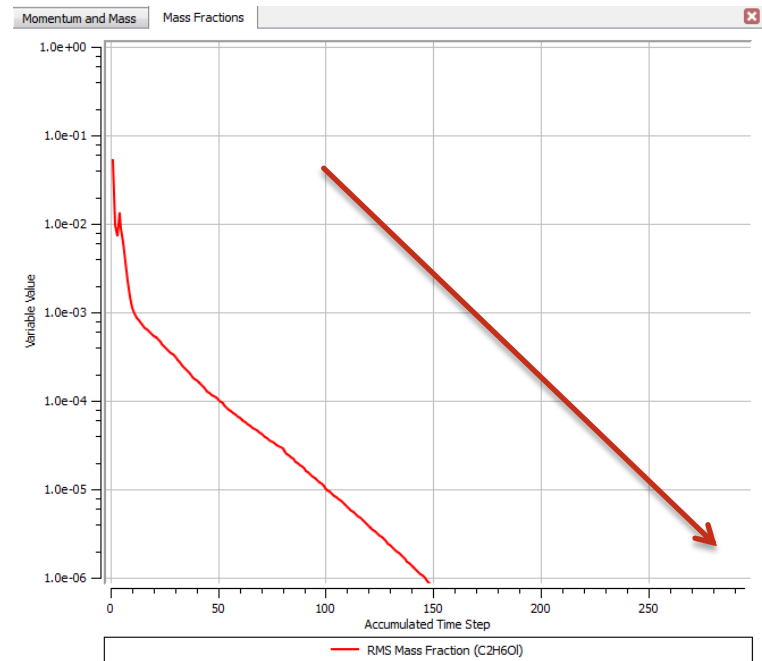
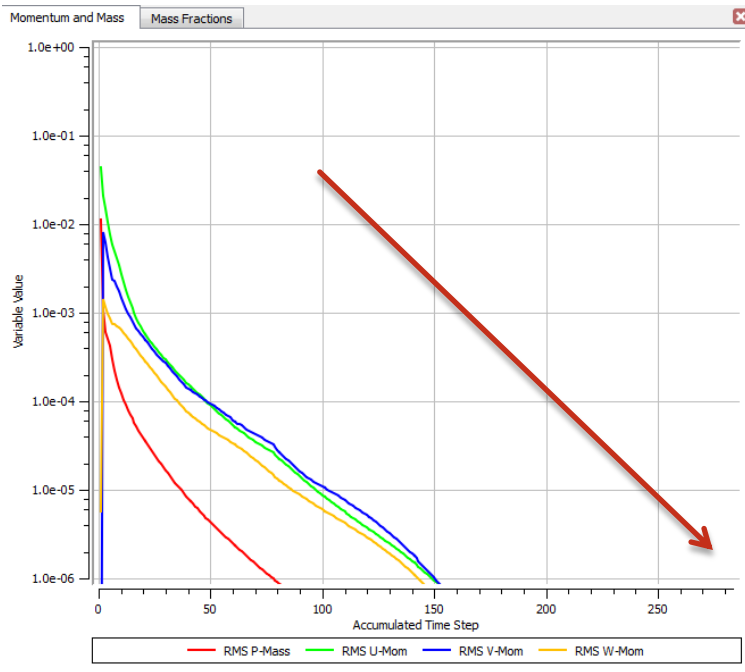
Processamento (Solver)

- ▶ O solver plota então o gráfico dos resíduos:



Processamento (Solver)

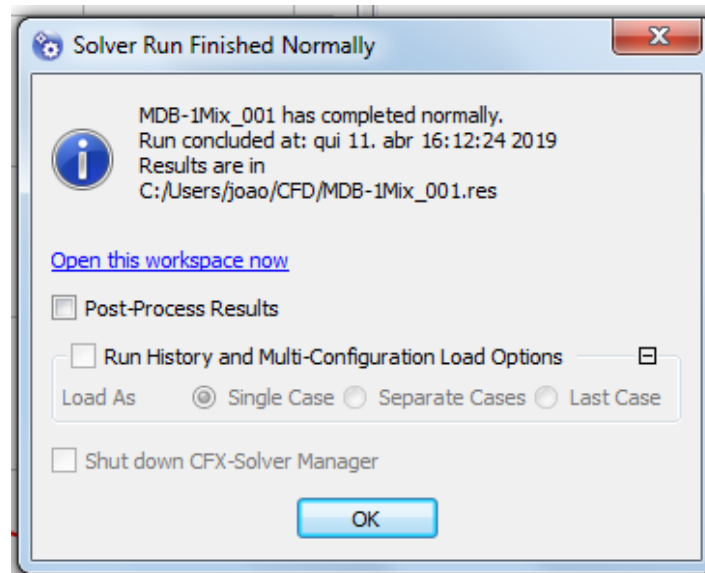
- ▶ O solver plota então o gráfico dos resíduos:



Boa convergência da simulação, além de boa estabilidade (curva de resíduos é suave, não flutuando), resíduos-alvo atingidos após pouco mais de 150 iterações.

Processamento (Solver)

- ▶ A janela avisa o final da simulação e criação do arquivo .res



- ▶ Um arquivo .res (MDB-1Mix_001.res) é criado, contendo todas as informações do campo de escoamento predito na simulação.
- ▶ Demais informações podem ser conferidas no arquivo .out

Processamento (Solver)

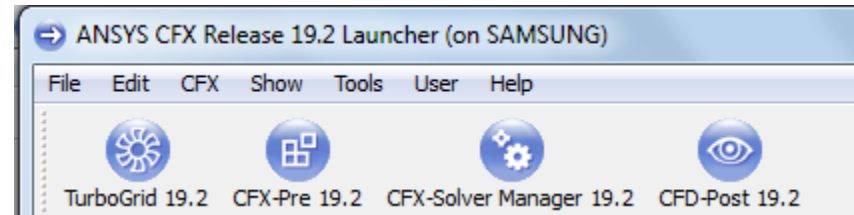
- ▶ Informações importantes do arquivo de texto (.out):
 - Neste exemplo, a simulação convergiu facilmente, portanto os resíduos e os imbalances estarão todos OK.
 - Estes podem ser conferidos no .out em:

Normalised Imbalance Summary		
Equation	Maximum Flow	Imbalance (%)
U-Mom	1.6710E+00	-0.0008
V-Mom	1.6710E+00	-0.0005
W-Mom	1.6710E+00	0.0004
P-Mass	2.0323E-02	0.0002
C2H6O1-Mass Fraction	9.3913E-03	0.0011

- Informações de tempo de processamento e valores mínimos e máximos das variáveis também são listados no .out

Pós-Processamento

- ▶ Abra o CFD-Post 19.2, pelo launcher:



- ▶ File > Load Results
- ▶ Selecione o .res criado ao final da simulação (MDB1-Mix_001.res)

Pós-Processamento

- ▶ No CFD Post, diversos modos de visualização dos resultados são possíveis, incluindo:
 - Gráficos com base em linhas; Planos para plotagem de perfis
 - Contornos; Campos vetoriais; Linhas de corrente
 - Entre vários outros.
- ▶ Para os casos de estudo, focaremos no uso de planos.

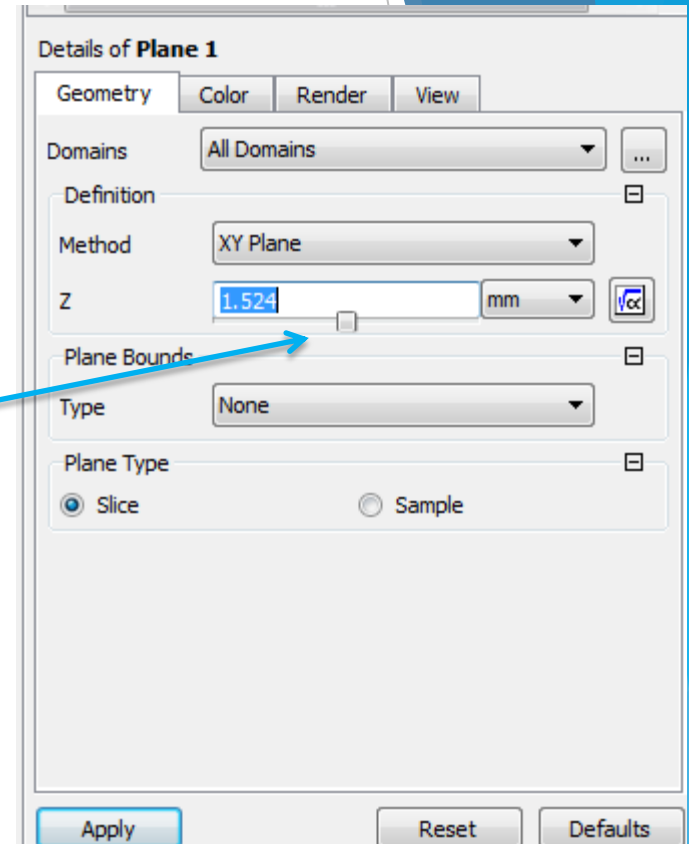
Para mais detalhes de pós-processamento, recomenda-se o tutorial *Result CFD Post*, disponível em:

<https://www.youtube.com/watch?v=bUKY0F9LINY&list=PLo9wNIzLutz-OdUEYgF5JmrwdGD4vZEto>

Pós-Processamento

► Plano central ao longo do misturador:

- Location > Plane: Name Plane 1 > OK
- Method: XY Plane
- $Z = 1.5 \text{ [mm]}^*$
- Note que clicando no campo Z, pode-se deslizar para determinar o valor ou definir ele diretamente
- Demais parâmetros inalterados
- Apply



A unidade de medida do Post pode ser alterada em Edit > Options > Units

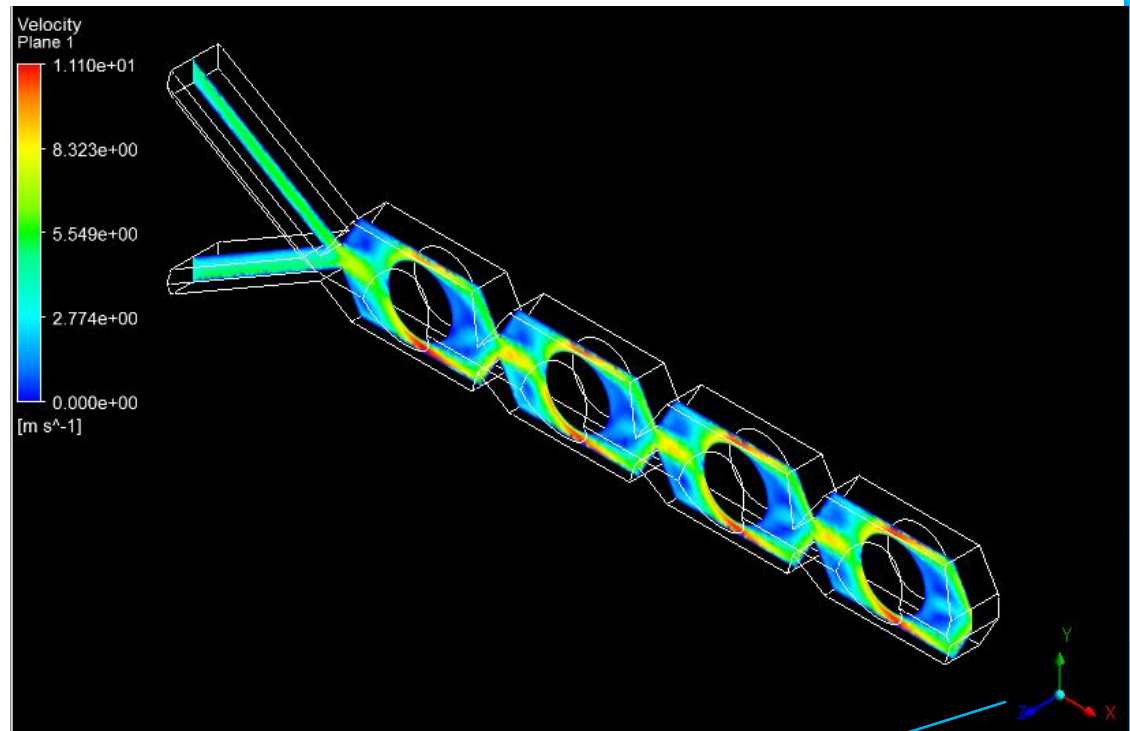
Pós-Processamento

► Plano central ao longo do misturador:

- Aba Color > Mode: Variable; escolha a variável a ser plotada, ex. Velocity

Demais parâmetros
inalterados

Para melhor
visualização, na Aba
Render, desabilite a
caixa Lighting



Clicando nos eixos a perspectiva de visão é alterada

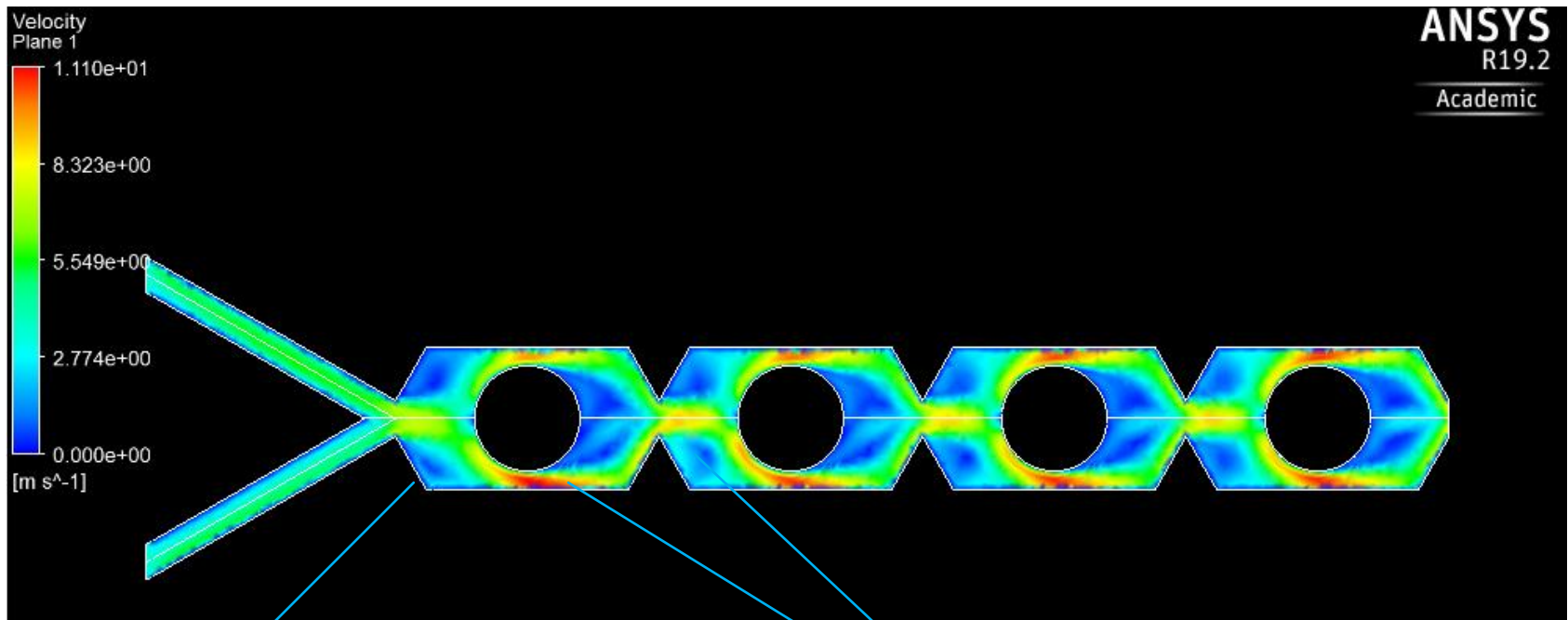
Pós-Processamento

► Plano central ao longo do misturador:

- Na aba Color, quando se define a variável a ser plotada existem 3 opções:
 1. Global: plota-se com base nos valores mínimo e máximo da variável em todo o domínio
 2. Local: plota-se com base nos valores mínimo e máximo da variável em todo o local (neste caso do plano em $Z = 1.5 \text{ mm}$)
 3. User Specified: o usuário define os valores mínimo e máximo

Pós-Processamento

- ▶ **Plano central ao longo do misturador:**
 - Análise qualitativa do padrão de escoamento observado

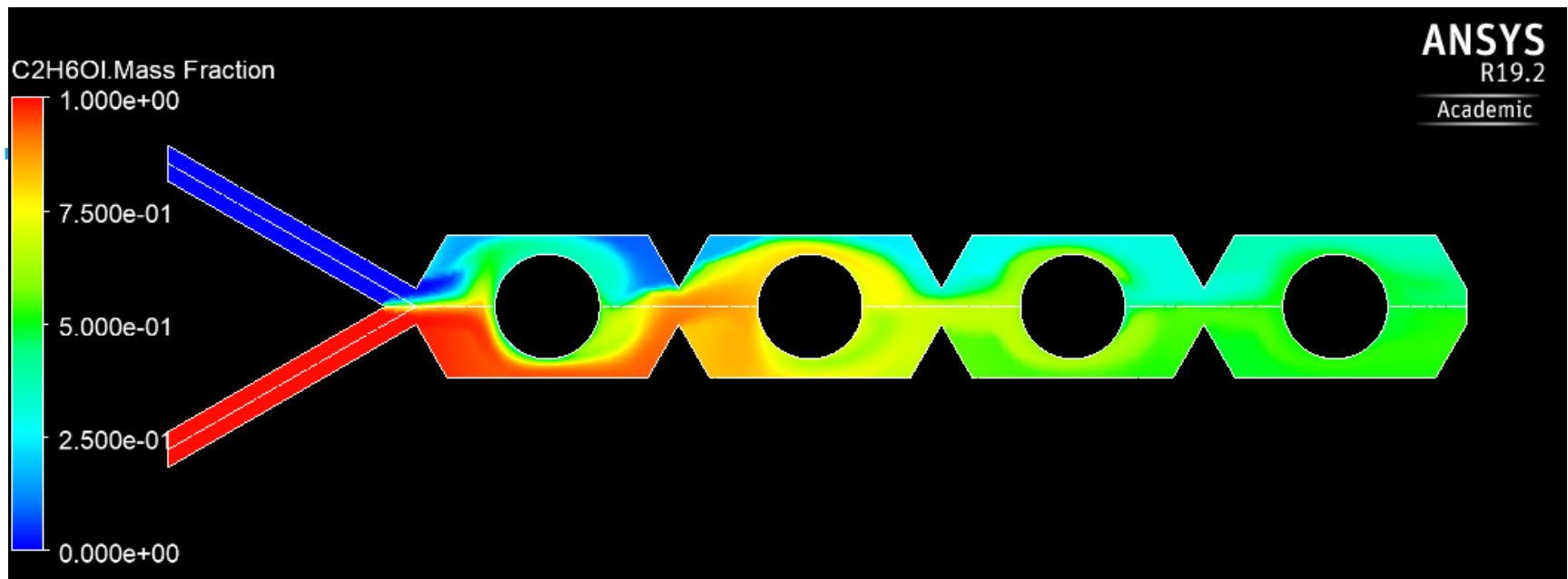


Não-deslizamento definido no setup

Aceleração nas seções estranguladas

Pós-Processamento

- ▶ **Plano central ao longo do misturador:**
 - Alterando a Variable para C2H6OI.Mass Fraction, podemos analisar o padrão de mistura:



Pós-Processamento

► Plano na seção transversal do escoamento:

- A análise da eficiência de mistura é feita com base no índice de mistura M , parâmetro estatístico fundamentado na distribuição da espécie A em planos normais ao escoamento:

$$M = 1 - \sqrt{\frac{\sigma^2}{\sigma_{max}^2}}$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum (Y_i - \bar{Y})^2}{N}}$$

- Sendo σ o desvio padrão da fração mássica (Y) no plano transversal (ao final do canal de mistura), e σ_{max} o máximo desvio padrão no plano transversal (entrada do canal de mistura)

Pós-Processamento

▶ Plano transversais no canal – final do canal:

- Location > Plane: Name Plane 2 > OK
- Method: YZ Plane
- $X = 21 \text{ [mm]}^*$
- Demais parâmetros inalterados
- Apply

* Evite pegar os resultados nas superfícies das condições de contorno, pois se a variável for prescrita, (valor definido no setup), está poderá influenciar o valor lido.

Pós-Processamento

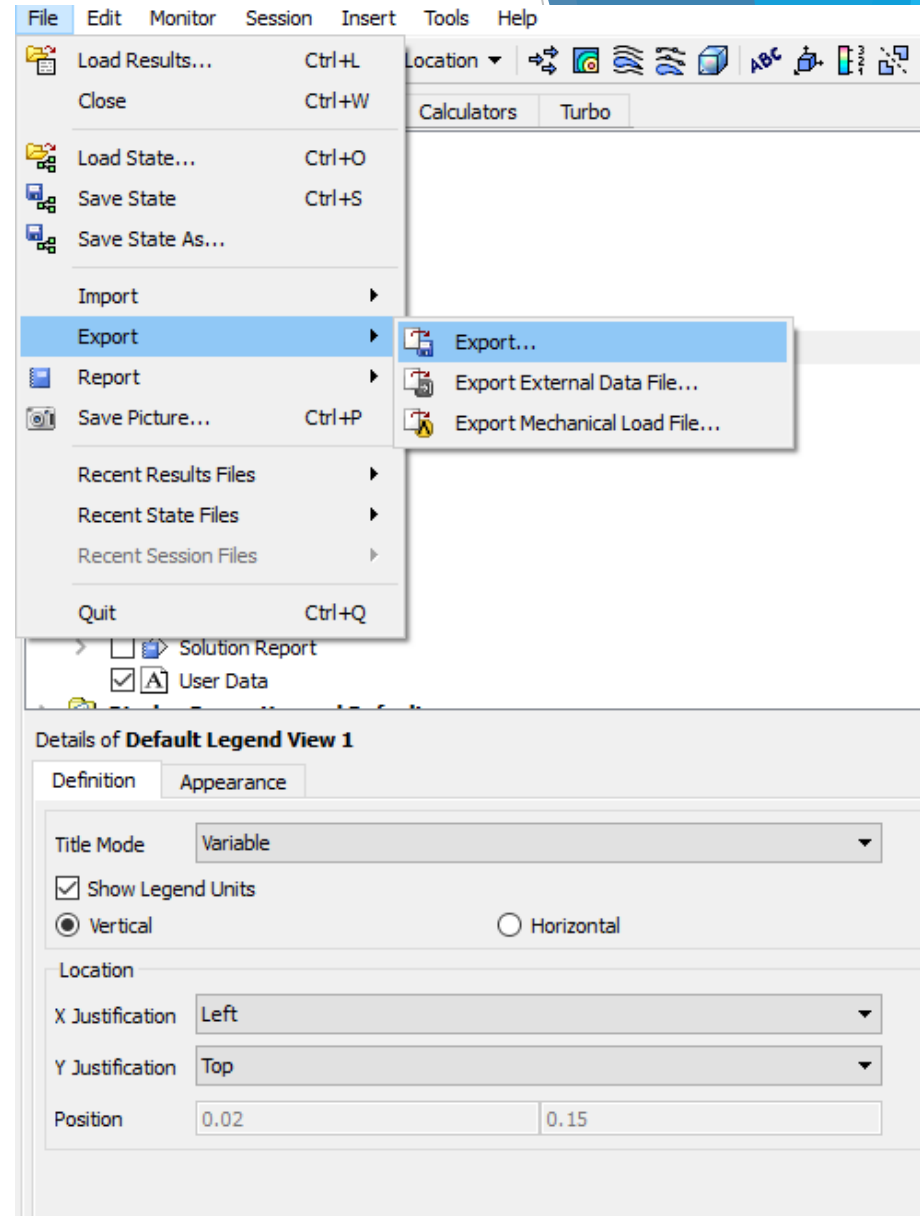
► Plano transversais no canal – início do canal:

- Location > Plane: Name Plane 3 > OK
- Method: YZ Plane
- X = -16.5 [mm]
- Demais parâmetros inalterados
- Apply

Os dois planos criados (final e início do canal) serão usados para exportação dos dados para posterior análise estatística

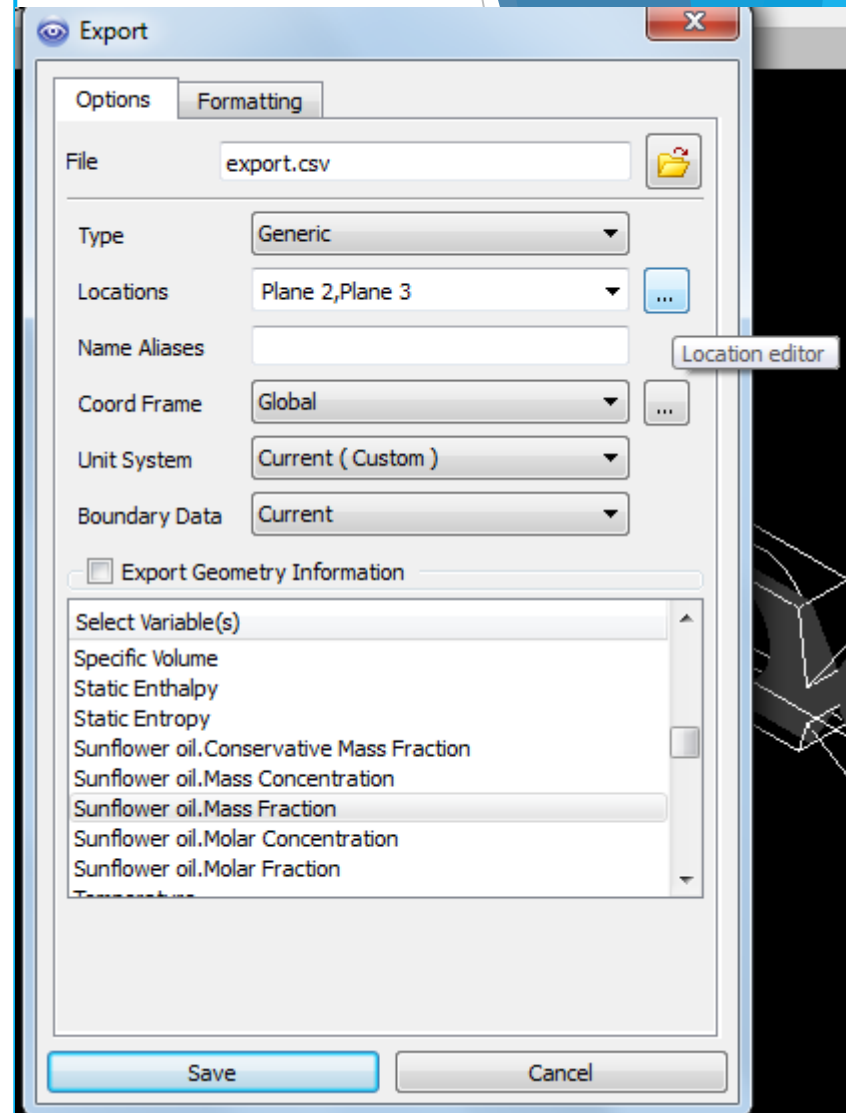
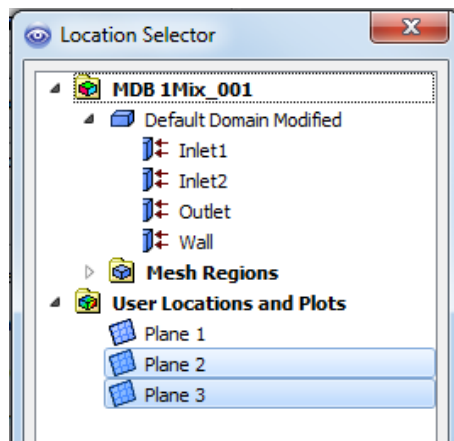
Pós-Processamento

- ▶ Exportando dados numéricos a partir de planos:
- ▶ File > Export > Export...



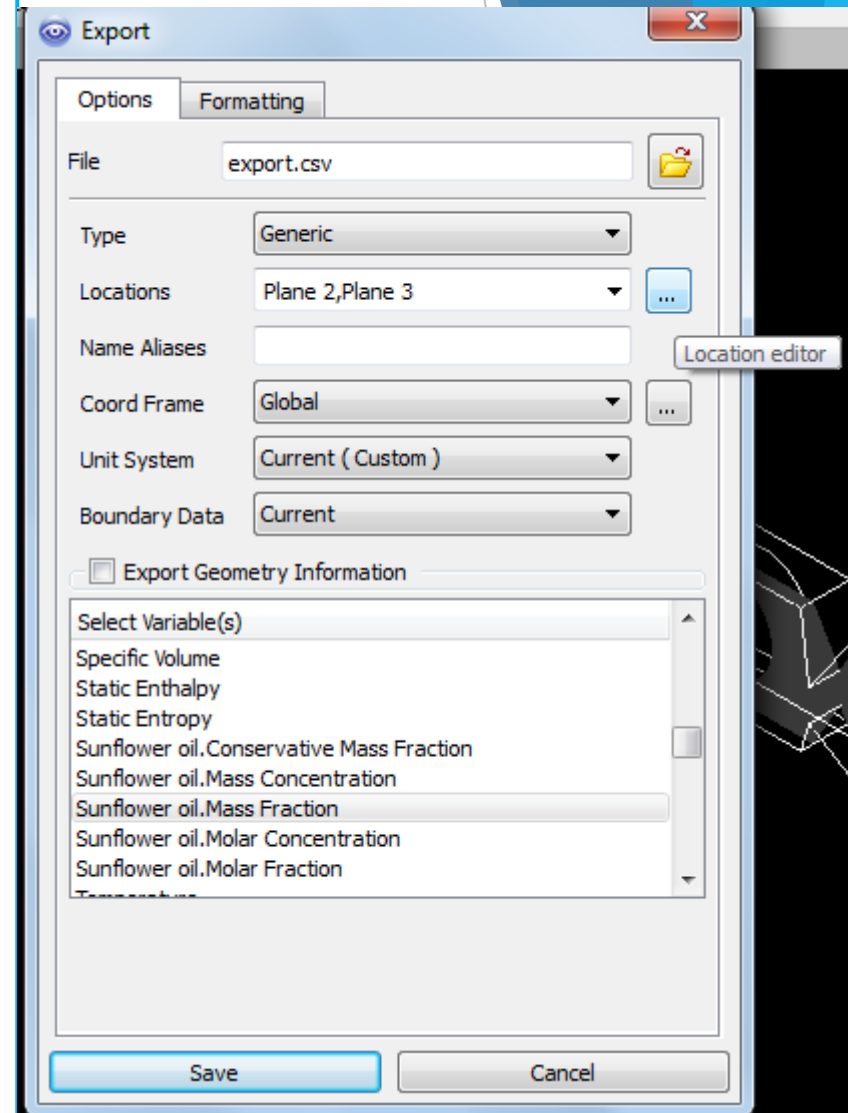
Pós-Processamento

- ▶ Na janela aberta:
 - File: nome do arquivo .csv (e também onde este será salvo, clicando no ícone da pasta)
 - Locations: clicando no ícone dos três pontos (Location editor), se abre a lista das localizações, selecione Plane 2 e Plane 3



Pós-Processamento

- ▶ Na janela aberta:
 - Desabilite a caixa Export Geometry Information
 - Selecione a(s) variável(is) de interesse, i.e., Sunflower oil.Mass Fraction
 - Save: criar a planilha .csv



Pós-Processamento

- ▶ Planilha .csv:
- ▶ Dados de arquivos .csv abrem diretamente no Excel (ou LibreOffice Calc), ou podem ser importados em: Dados > de Texto (no Excel): selecione o arquivo .csv

Local dos dados

Nome da variável exportada

Valores da variável no local (plano)

Atenção no separador decimal do Excel/LibreOffice Calc (. ou ,)
O CFD-Post utiliza ponto como separador decimal

	A	B	C	D
1				
2	[Name]			
3	Plane 2			
4				
5	[Data]			
6	Sunflower oil.Mass Fraction			
7	4.86E-01			
8	4.86E-01			
9	4.87E-01			
10	4.73E-01			
11	4.76E-01			
12	4.72E-01			
13	4.87E-01			
14	4.69E-01			
15	4.75E-01			
16	4.70E-01			
17	4.69E-01			
18	4.70E-01			

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

Descrição: Mistura reativa entre solução etanólica de hidróxido de sódio e óleo de girassol, produzindo biodiesel e glicerina.

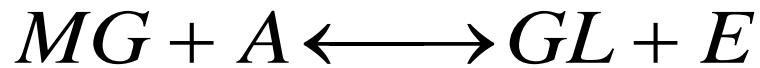
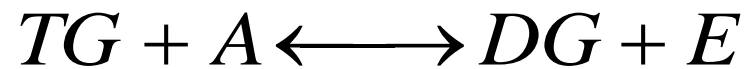
Hipóteses:

- ▶ Mistura binária monofásica reativa (reação química homogênea);
- ▶ Mistura entre as espécies é modelada pela difusão mássica e efeitos convectivos do escoamento;
- ▶ Fluido Newtoniano;
- ▶ Escoamento incompressível, isotérmico em regime laminar e estado-estacionário.

Síntese de biodiesel em meios alcalinos

Fundamentação:

- ▶ 3 reações consecutivas (óleo é composto por mono, di e triglicerídeos, *MG*, *DG* e *TG*) entre óleo e álcool (adicionado em excesso):

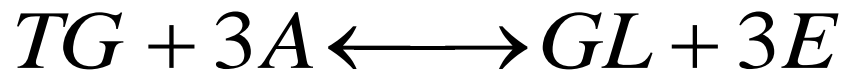


- ▶ Formando éster (*E*, biodiesel) a cada etapa e glicerina (*GL*) na 3ª etapa.

Síntese de biodiesel em meios alcalinos

Fundamentação:

- ▶ Balanço global das 3 etapas reativas fornece:



- ▶ O modelo cinético acoplado ao fluidodinâmico é fundamentado na equação e na estequiometria global acima, considerando as reações direta e reversa:

$$-r_{TG} = -\frac{dC_{TG}}{dt} = \vec{k} C_{TG} C_A - \overleftarrow{k} C_{GL} C_E$$

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

Com base nas hipóteses, o solver resolverá:

Conservação de massa total (continuidade):

$$\nabla \cdot U = 0$$

Navier-Stokes:

$$\rho (U \cdot \nabla U) = -\nabla p + \mu \nabla^2 U + \rho g$$

Balanco de massa da espécie i/restricção da fração mássica:

$$\rho (U \cdot \nabla Y_i) = \rho D_i \nabla^2 Y_i + S_i \qquad Y_j = 1 - \sum_{i \neq j} Y_i$$

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

Balanço de massa da espécie i :

$$\rho (U \cdot \nabla Y_i) = \rho D_i \nabla^2 Y_i + S_i$$

S_i é o termo de geração/consumo de massa da espécie i , em $\text{kg/m}^3 \cdot \text{s}$, devido à reação química, dado por:

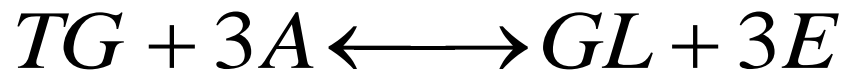
$$S_i = \left(\underbrace{\sum_{r_r}^n \nu_i'' r_r}_{\text{Geração}} - \underbrace{\sum_{r_r}^n \nu_i' r_r}_{\text{Consumo}} \right) M_{Wi}$$

Massa molar
(conversão para
base mássica)

Coeficiente estequiométrico (ν) x taxa de reação (r_r)

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

Considerando a equação química global:



O balanço estequiométrico fica:

$$-\frac{r_{TG}}{1} = -\frac{r_A}{3} = \frac{r_{GL}}{1} = \frac{r_E}{3}$$

Usando a relação estequiométrica sendo TG o reagente limitante*, as equações de transporte são dada a seguir.

* Álcool em excesso.

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

Reagentes:

$$\text{Óleo (TG): } \rho(U \cdot \nabla Y_{TG}) = \rho D_{TG} \nabla^2 Y_{TG} + (r_{TG}) M_{WTG}$$

$$\text{Etanol (A): } \rho(U \cdot \nabla Y_A) = \rho D_A \nabla^2 Y_A + (3r_{TG}) M_{WA}$$

Produtos:

$$\text{Glicerina (GL): } \rho(U \cdot \nabla Y_{GL}) = \rho D_{GL} \nabla^2 Y_{GL} + (-r_{TG}) M_{WGL}$$

$$\text{Biodiesel (E): } \rho(U \cdot \nabla Y_E) = \rho D_E \nabla^2 Y_E + (-3r_{TG}) M_{WE}$$

Expressão de taxa de reação:

$$-r_{TG} = -\frac{dC_{TG}}{dt} = \vec{k} C_{TG} C_A - \overleftarrow{k} C_{GL} C_E$$

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

► Expressão de taxa de reação:

$$-r_{TG} = -\frac{dC_{TG}}{dt} = \vec{k} C_{TG} C_A - \overleftarrow{k} C_{GL} C_E$$

- Os valores das constantes de taxa de reação (k), são obtidos a partir de estudos cinéticos (Marjanovic et al., 2010), para a condição operacional (já incluem os efeitos do catalisador NaOH):

T (°C)	Razão Molar Etanol:Óleo	Conc. NaOH (wt. %)	$\vec{k} \times 10^6$ (m ³ mol ⁻¹ s ⁻¹)	$\overleftarrow{k} \times 10^8$ (m ³ mol ⁻¹ s ⁻¹)
50	9:1	1,00	15,68	9,42

Modelagem Matemática: Caso de estudo 2: mistura e reação química entre dois fluidos

- ▶ **Inerte:**
- ▶ Para casos reativos, uma espécie inerte pode ser adicionada à mistura, sendo esta definida como *Constraint* na simulação.
- ▶ A fração mássica desta é calculada por:

$$Y_{INERT\ OIL} = 1 - Y_{TG} - Y_A - Y_{GL} - Y_E$$

Setup do caso de estudo 2

- ▶ **Partindo do .def anterior (caso 1 – mistura entre fluidos):**
- ▶ Abra o CFX-Pre 19.2
- ▶ File > Open Case: selecione o arquivo .def (MDB1-Mix.def)

Como a mistura fluida agora será composta por 5 espécies químicas:

óleo de girassol, etanol, glicerol, biodiesel e inerte

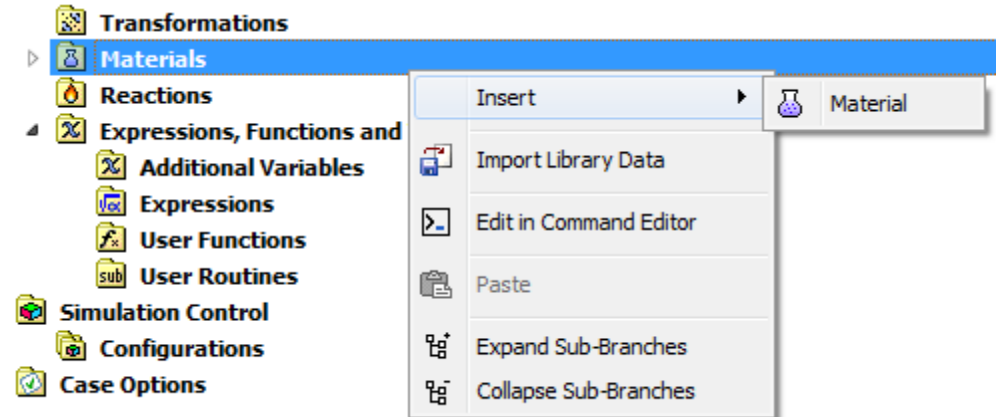
Precisamos criar estas três últimas espécies

Setup do caso de estudo 2

► Relembrando...

► Criando a Glicerina:

- Clique com o direito em Materials > Insert > Material
- Name: Glicerol.
- Aba Basic Setting: Option > Pure Substance,
- Clique na caixa Thermodynamic State > selecione Liquid.



Setup do caso de estudo 2

► Definindo as propriedades do Glicerol:

► Aba Material Properties:

▪ Thermodynamic Properties:

Molar Mass: $92.08 \text{ kg kmol}^{-1}$

Density: 1244.3 kg m^{-3}

▪ Transport properties: (clique no +)

Dynamic viscosity: 0.1465 Pa s^{-1}

Outline Material: Glycerol

Details of **Glycerol**

Basic Settings Material Properties

Option General Material

Thermodynamic Properties

Equation of State

Option Value

Molar Mass 92.08 [kg kmol⁻¹]

Density 1244.3 [kg m⁻³]

☒ Specific Heat Capacity

Option Value

Specific Heat Capacity 2508 [J kg⁻¹ K⁻¹]

Specific Heat Type Constant Pressure

☐ Reference State

Transport Properties

☒ Dynamic Viscosity

Option Value

Dynamic Viscosity 0.1465 [Pa s]

☒ Thermal Conductivity

Option Value

Thermal Conductivity 0.2884 [W m⁻¹ K⁻¹]

Radiation Properties

☐ Buoyancy Properties

Electromagnetic Properties

Setup do caso de estudo 2

Obs.: O valor do *Specific Heat Capacity* (C_p) é usado para determinar a entalpia, mesmo em casos isotérmicos, sendo requerido pelo CFX (ex. use o C_p da água caso não tenha o valor real do fluido)

Material: Glicerol

Details of **Glicerol**

Basic Settings | Material Properties

Option: General Material

Thermodynamic Properties

Equation of State

Option: Value

Molar Mass: 92.08 [kg kmol⁻¹]

Density: 1244.3 [kg m⁻³]

☒ Specific Heat Capacity

Option: Value

Specific Heat Capacity: 2508 [J kg⁻¹ K⁻¹]

Specific Heat Type: Constant Pressure

☐ Reference State

Transport Properties

☒ Dynamic Viscosity

Option: Value

Dynamic Viscosity: 0.1465 [Pa s]

☒ Thermal Conductivity

Option: Value

Thermal Conductivity: 0.2884 [W m⁻¹ K⁻¹]

Radiation Properties

☐ Buoyancy Properties

Electromagnetic Properties

Setup do caso de estudo 2

- ▶ Repita o procedimento de criação para o biodiesel:

Molar mass (kg kmol⁻¹)	Density (kg m⁻³)	Specific heat capacity (J kg⁻¹ K⁻¹)	Dynamic viscosity (Pa s)
308.45	861.01	2500	0.003

- ▶ Para a criação do inerte (considerado com propriedades similares a do óleo):
- ▶ Na árvore Materials, clique com o direito em Sunflower Oil > Duplicate
- ▶ Na cópia criada, clique com o direito > Rename: insira Inert

Setup do caso de estudo 2

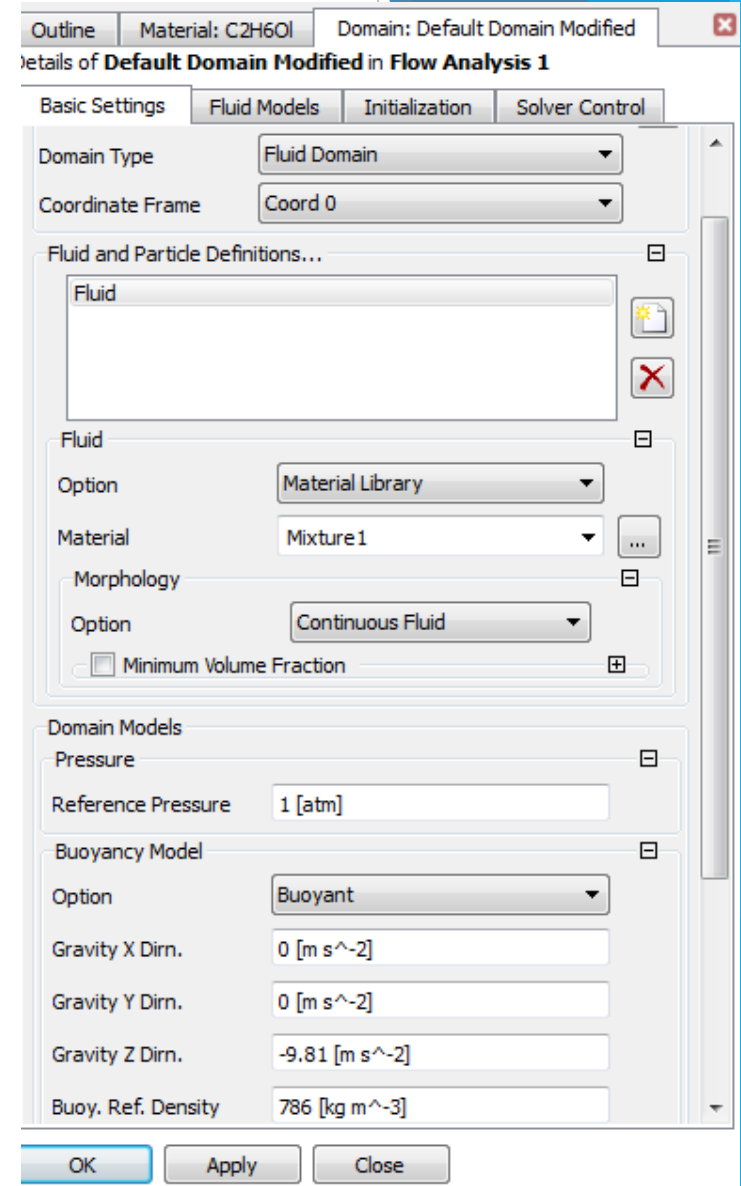
► Criando a mistura multicomponente:

- Clique duplo em Name: Mixture1
- Aba Basic Setting > Option > Variable Composition Mixture
- Clique na caixa Thermodynamic State > Liquid.
- Material List: selecione Sunflower Oil, C₂H₆OI, Glicerol, Biodiesel e o Inert.

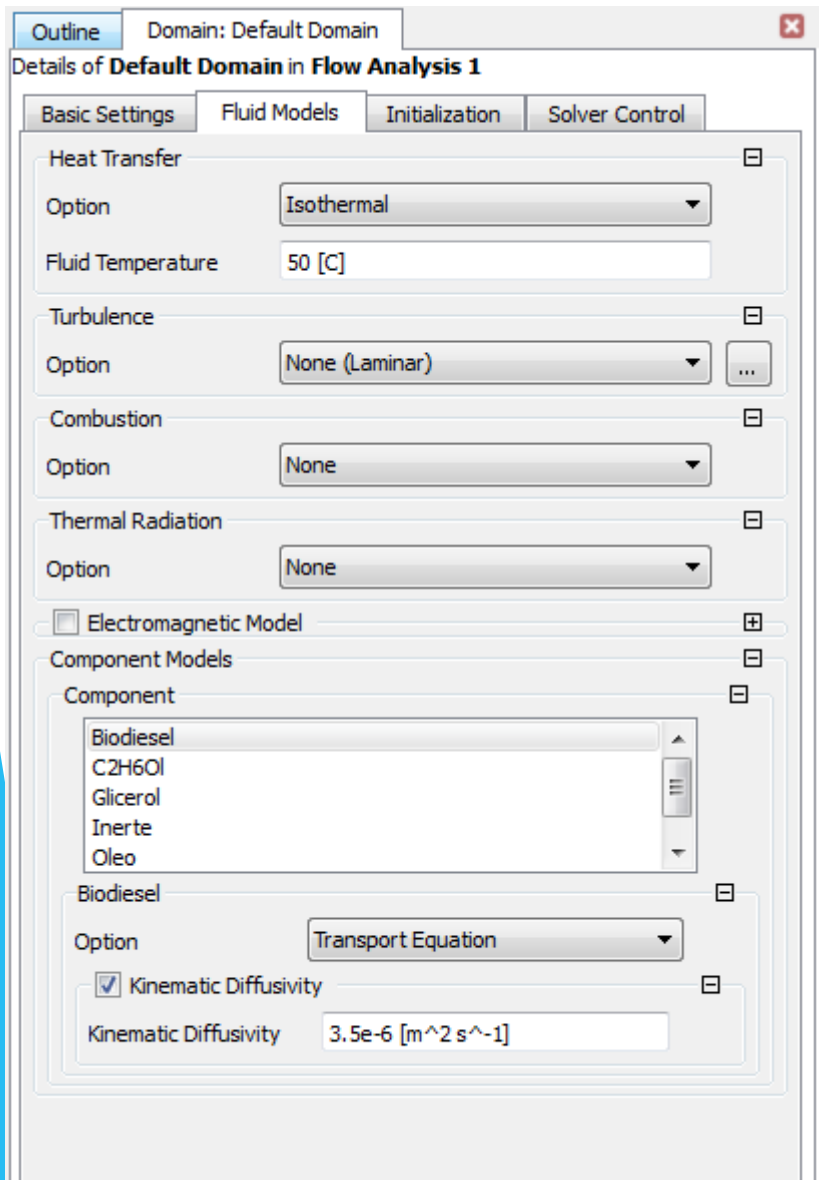
Setup do caso de estudo 2

► Demais definições globais do caso:

- Default Domain > Aba Basic Settings:
- Fluid and Particle Definitions > Material: selecione Mixture1 como Continuous Fluid.
- Buoyancy Model > Buoyant: defina o eixo de atuação da gravidade e a densidade de referência (e.g., etanol = 786 kg m^{-3}).
- Demais parâmetros inalterados



Setup do caso de estudo 2



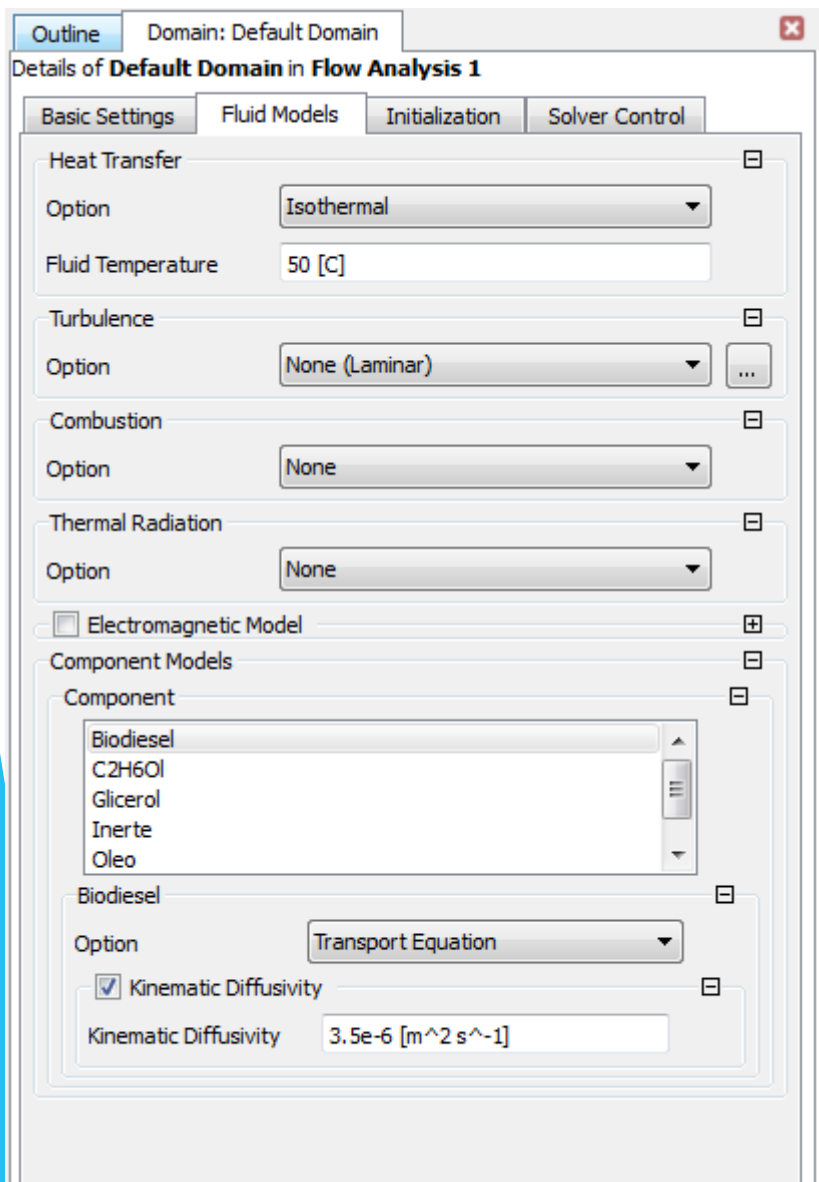
► Demais definições globais do caso:

Default Domain, aba Fluid Models:

Heat Transfer > Isothermal > 50 °C

Turbulence > None (Laminar).

Setup do caso de estudo 2



▶ Definindo o coeficiente de difusão mássica:

- Component Models > Transport Equation para Biodiesel, clique na caixa Kinematic Diffusivity e insira o valor ($3.5e-06 \text{ m}^2/\text{s}$)*

* Valores previamente determinados por correlações empíricas (ex. Wilke-Chang) ou tomados de dados experimentais

Setup do caso de estudo 2

- Selecione Transport Equation para as demais espécies que participam da reação química e clique na caixa Kinematic Diffusivity.
- Insira os seguintes valores Kinematic Diffusivity

Espécie química	Kinematic Diffusivity Coefficient ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
C2H6OI	9.2e-07
Glicerol	0.00012
Sunflower Oil	2.4e-05

- Selecione a opção Constraint para o Inert

Setup do caso de estudo 2: Condições de Contorno

▶ **Entrada de etanol puro:**

- Clique duplo em Inlet1
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > Normal Speed > valor prescrito conforme o tempo de residência (ou tempo espacial requerido) e a razão molar etanol:óleo de 9 (e.g. 0.0428 cm/s).
- Component Details > C₂H₆O Mass Fraction = 1 (etanol puro)
- As frações mássicas dos demais componentes iguais a 0

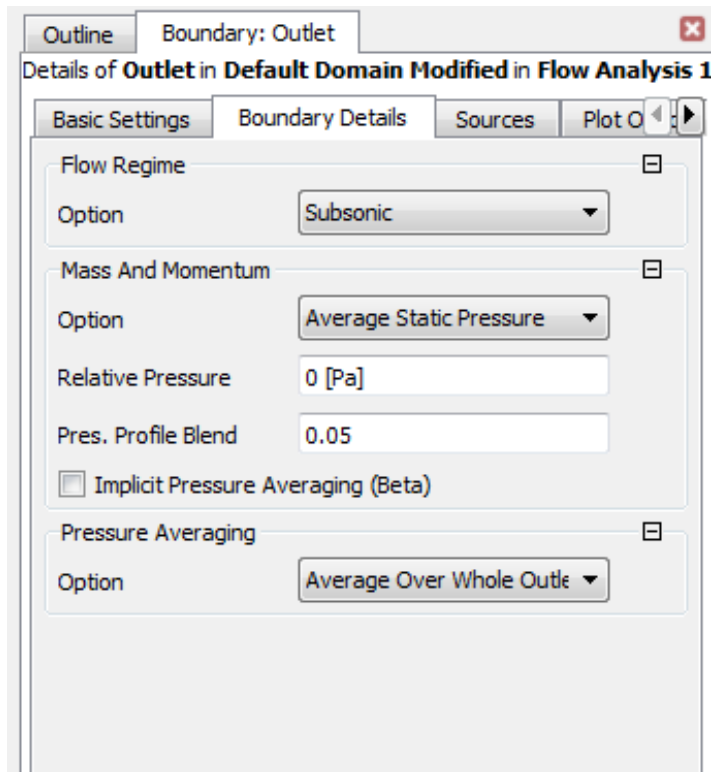
Setup do caso de estudo 2: Condições de Contorno

▶ Entrada de óleo puro:

- Clique duplo em Inlet2
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > Normal Speed > valor prescrito conforme o tempo de residência (ou tempo espacial requerido) e a razão molar etanol:óleo de 9 (e.g. 0.07699 cm/s).*
- Component Details > Sunflower Oil Mass Fraction = 1 (óleo puro)
- ▶ As frações mássicas dos demais componentes iguais a 0

- Para escoamento de etanol:óleo de girassol na razão molar 9:1, com entradas de mesma área, a razão entre as velocidades será de $U_{\text{óleo}} \approx 1,8 \cdot U_{\text{etanol}}$ (sendo U a velocidade média na entrada)

Setup do caso de estudo 2: Condições de Contorno



► Saída:

- Manter igual a usada no caso 1:
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > Average Static Pressure.
- Relativa Pressure = 0 (descarrega para atmosfera)

Setup do caso de estudo 2: Condições de Contorno

► Paredes:

- Manter igual a do caso 1
- Aba Boundary Details:
- Mass and Momentum > No Slip Wall

(condição de não-deslizamento nas paredes)

Termo fonte de massa devido a reação química

- ▶ Como a reação química é homogênea, deve-se definir o volume (subdomínio computacional) onde ela ocorre.
- ▶ Para o caso de estudo 2, o próprio volume total do microcanal.
- Clique no ícone Subdomain

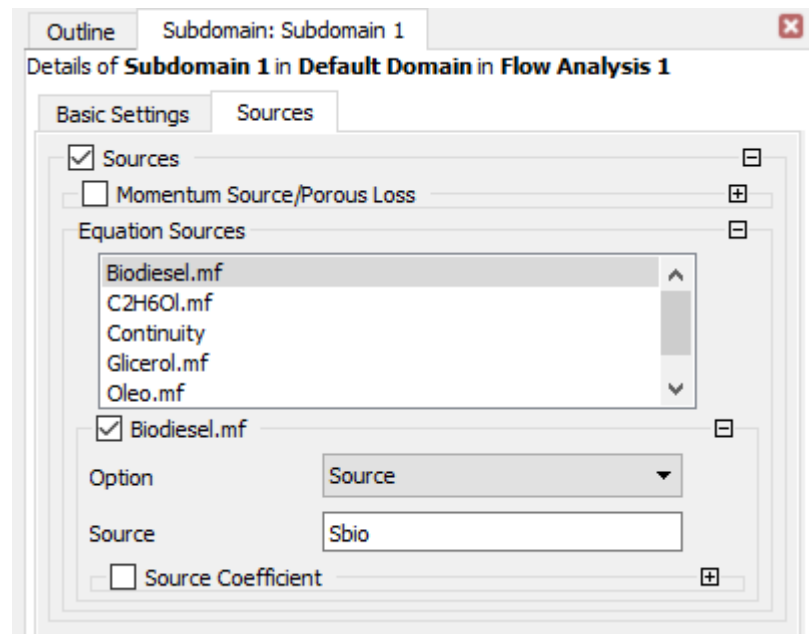


- Ou Insert > Subdomain no menu superior

Termo fonte de massa devido a reação química

- ▶ Aba Basic Settings: selecione o volume (domínio) correspondente ao microcanal.
- ▶ Aba Sources: marque a caixa Sources
- ▶ Marque também as caixas em Equation Sources:
 - Biodiesel.mf
 - C2H6Ol.mf
 - Glicerol.mf
 - Oleo.mf

Biodiesel.mf: indica a equação da fração mássica (.mf) da espécie química

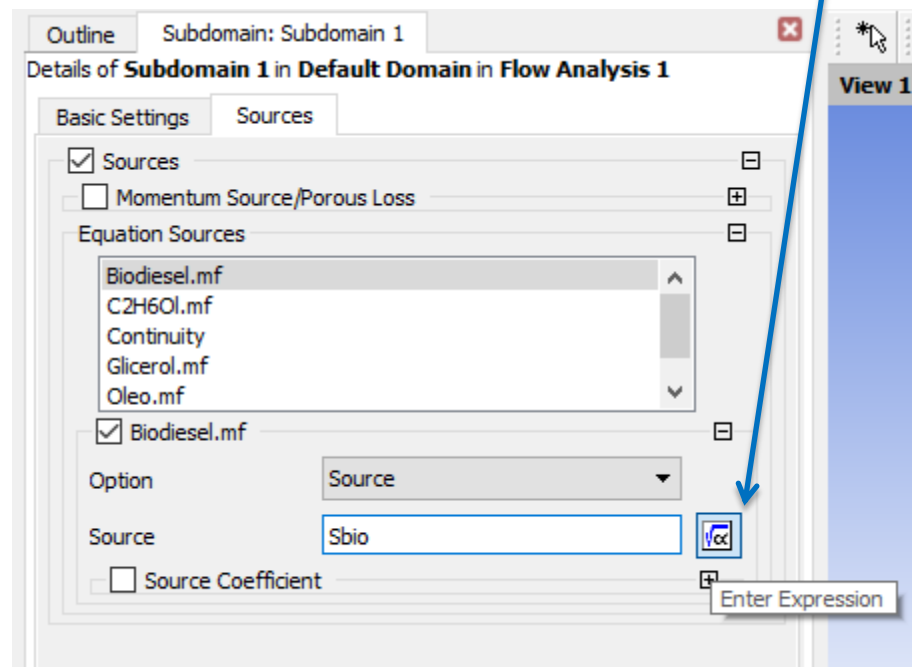


Termo fonte de massa devido a reação química

➤ Em cada espécie, escolha a opção Source e clique no ícone Enter Expression, definido o nome da expressão como:

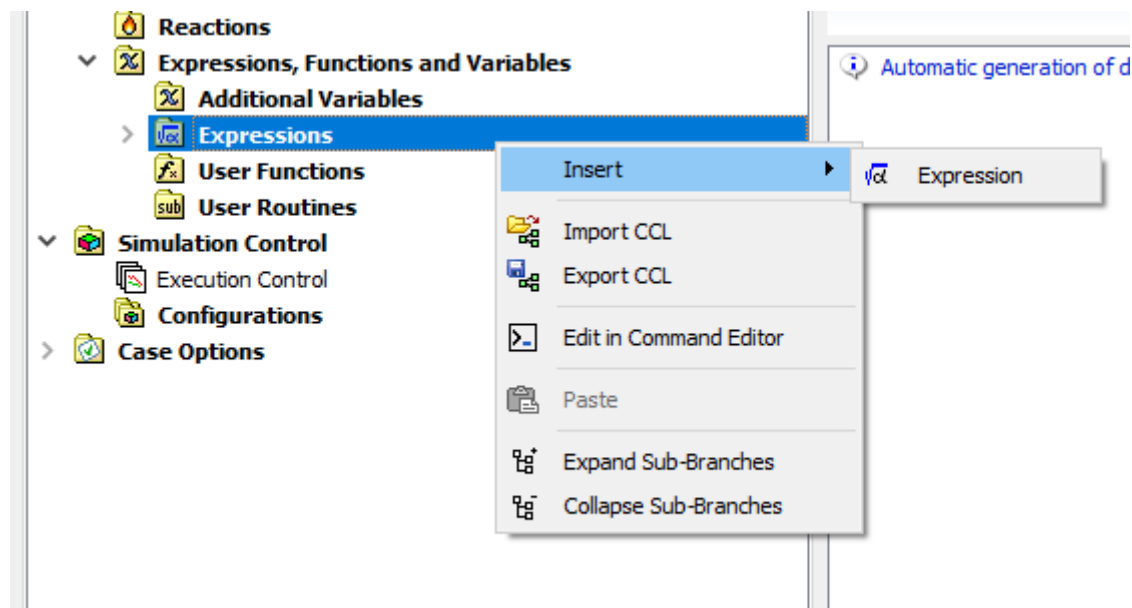
- Biodiesel.mf: Sbio
- C2H6Ol.mf: Setanol
- Glicerol.mf: Sglicerol
- Oleo.mf: Soleo

O nome da expressão definido aqui será utilizado para inserir a expressão das taxas de transferência de massa devido a reação química



Termo fonte de massa devido a reação química

- A opção Source necessita expressões com unidades de $\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$
- ▶ Para inserir as expressões:
- ▶ Clique com o direito em Expressions > Insert > Expression
- Insira o nome da expressão idêntico ao definido anteriormente em Equation Source, i.e., Soil para o óleo



Termo fonte de massa devido a reação química

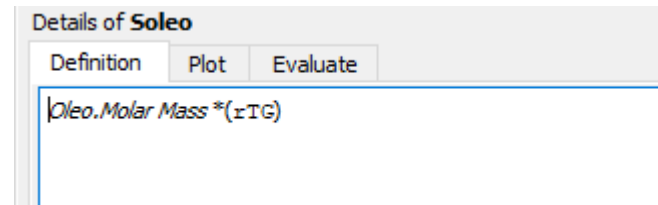
- Para o óleo:

$$\rho(U \cdot \nabla Y_{TG}) = \rho D_{TG} \nabla^2 Y_{TG} + (r_{TG})M_{WTG}$$

Termo fonte a ser inserido em Soleo

- Aba Definition, insira:

Sunflower Oil.Molar Mass*(rTG)



Massa molar do óleo (valor da propriedade e nome da espécie conforme definido em Materials)

Expressão da taxa de reação, ainda a ser definida

- Em clique Apply

Termo fonte de massa devido a reação química

- Padrão de nomenclatura em Expressions:

Sunflower Oil.Molar Mass*(rTG)



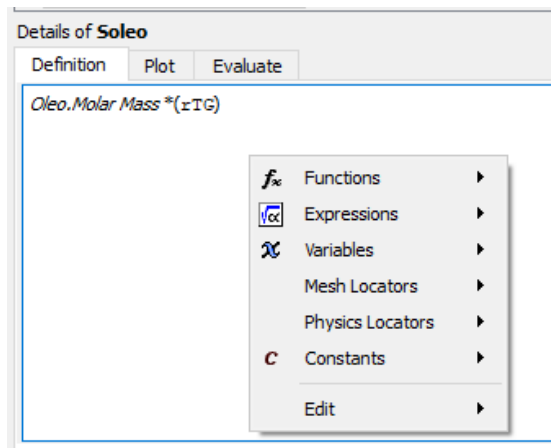
Espécie
química,
conforme
definido em
Materials

Variável do CFX (mais detalhes
no próximo slide)

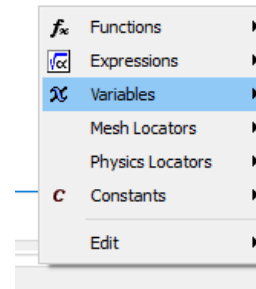
As unidades da expressão devem ser as mesmas requeridas da equação que esta faz parte, i.e., para fontes de massa, $\text{kg}/(\text{m}^3.\text{s})$

Termo fonte de massa devido a reação química

- Dica:
- ▶ Para selecionar uma variável, clique com o direito na área Definition, uma lista com constantes, locais, funções, expressões, nomes de variáveis, entre outros será exibida



```
molar Mass*(-3*TG)
olar Mass*(3*TG)
lar Mass*(-TG)
r Mass*(TG)
m^3 mol^-1 s^-1]
1^3 mol^-1 s^-1]
r.Molar Concentration*C2H6OL.Mol
```



v
w
x
y
z

Absolute Pressure --> Autoignition
Autoignition --> Averaged Volume Fraction
Averaged Volume Fraction --> Condensation Mass Flux
Condensation Mass Flux --> Current Stagger Iteration
Current Stagger Iteration --> Eddy Viscosity
Eddy Viscosity --> Evaporative Area
Evaporative Area --> Fuel Tracer
Fuel Tracer --> Group I Index
Group I Index --> Heat Flux to Liquid
Heat Flux to Liquid --> Isentropic Expansion Efficiency
Isentropic Expansion Efficiency --> Lighthill Stress vv
Lighthill Stress vv --> Magnetic Field X
Magnetic Field X --> Mesh Diffusivity
Mesh Diffusivity --> Molar Fraction
Molar Fraction --> Normalized Droplet Number
Normalized Droplet Number --> Particle Mixture Fraction Source Coefficient
Particle Mixture Fraction Source Coefficient --> Particle Radiation Source
Particle Radiation Source --> Pressure
Pressure --> Reaction Progress
Reaction Progress --> Rotation Velocity X
Rotation Velocity X --> Size Scale
Size Scale --> Solver Yplus
Solver Yplus --> Superficial Velocity
Superficial Velocity --> Time This Run
Time This Run --> Total Mesh Displacement Z
Total Mesh Displacement Z --> Turbulence Kinetic Energy
Turbulence Kinetic Energy --> Velocity Correlation vw
Velocity Correlation vw --> Vorticity Y
Vorticity Y --> Wall Irradiation Flux

Termo fonte de massa devido a reação química

- Crie expressões para as demais espécies:

Espécie Química	Equation Source (Expression Name)	Expression
Sunflower Oil	Soleo	Sunflower Oil.Molar Mass*(rTG)
Biodiesel	Sbio	Biodiesel.Molar Mass*(-3*rTG)
C2H6OI	Setanol	C2H6OI.Molar Mass*(3*rTG)
Glicerol	Sglicerol	Glicerol.Molar Mass*(-rTG)

Termo fonte de massa devido a reação química

- Definindo a expressão de taxa de reação:

$$-r_{TG} = -\frac{dC_{TG}}{dt} = \vec{k} C_{TG} C_A - \overleftarrow{k} C_{GL} C_E$$

- Crie a expressão com nome rTG e insira:

`-(kdir*Oleo.Molar Concentration*C2H6Ol.Molar Concentration-
kinv*Biodiesel.Molar Concentration*Glicerol.Molar Concentration)`

- Clique em Apply.
- Crie então mais duas expressões para kdir e kinv (constantes de taxa de reação direta e reversa).

Termo fonte de massa devido a reação química

- Dos dados experimentais para a condição operacional:

T (°C)	Razão Molar Etanol:Óleo	Conc. NaOH (wt. %)	$\times 10^6$ ($\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$)	$\times 10^8$ ($\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$)
50	9:1	1,00	15,68	9,42

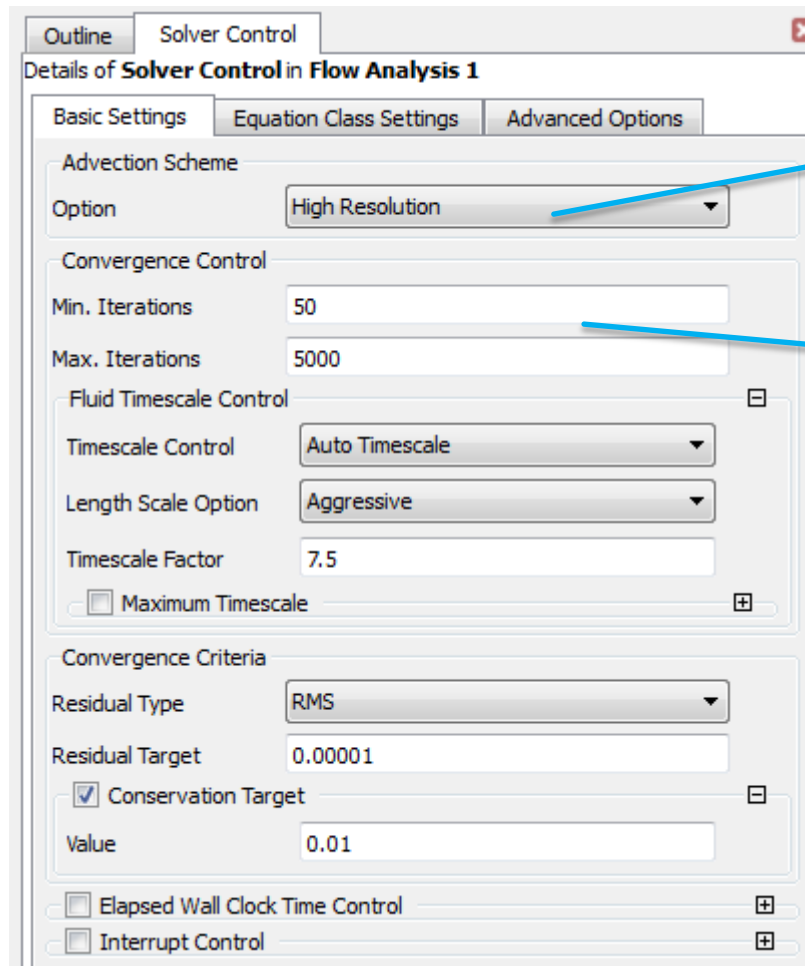
Equation Source (Expression Name)	Expression
kdir	$15.68\text{e-}6 [\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}]$
kinv	$9.42\text{e-}6 [\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}]$

Note que deve-se inserir as unidades das constantes!

Utilizar ponto como casa decimal!

Modelagem Matemática: Setup Caso 2: detalhes numéricos (mesmos do caso 1)

► Detalhes numéricos: Duplo clique em Solver Control



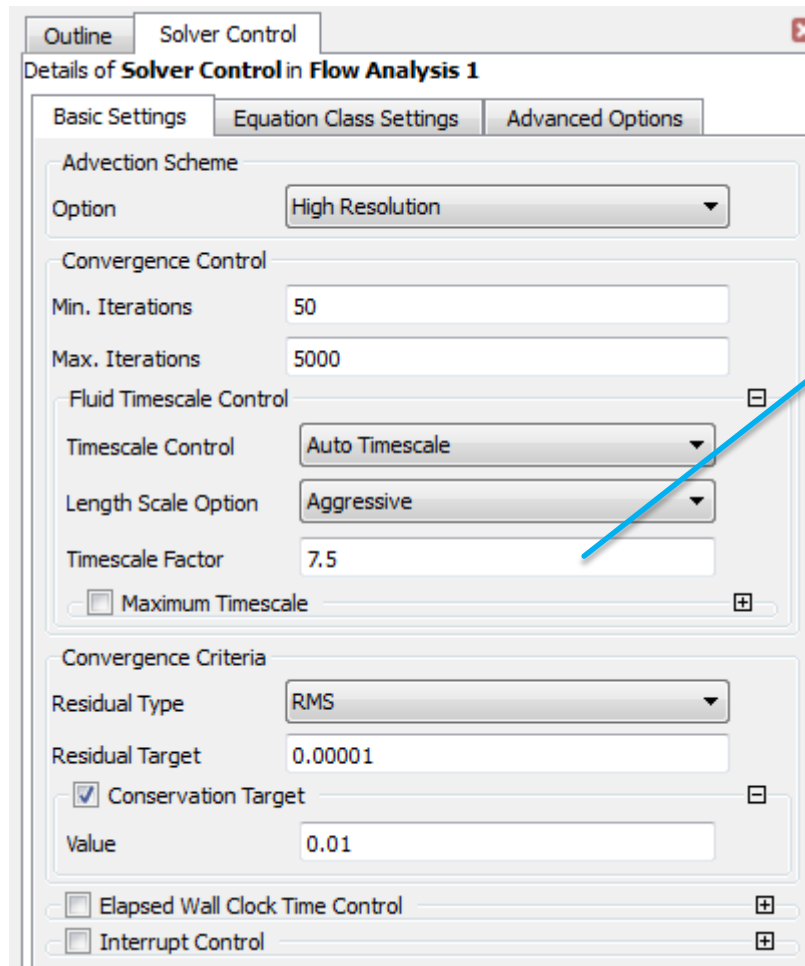
Esquema de discretização de alta ordem

Faixa de iterações da solução, e.g. pelo menos 50

* O Timescale Factor, bem como os outros parâmetros podem variar conforme a simulação, sendo os mais adequados definidos com base na experiência em simulações e o comportamento da solução destas

Modelagem Matemática: Setup Caso 2: detalhes numéricos

► Detalhes numéricos: Duplo clique em Solver Control



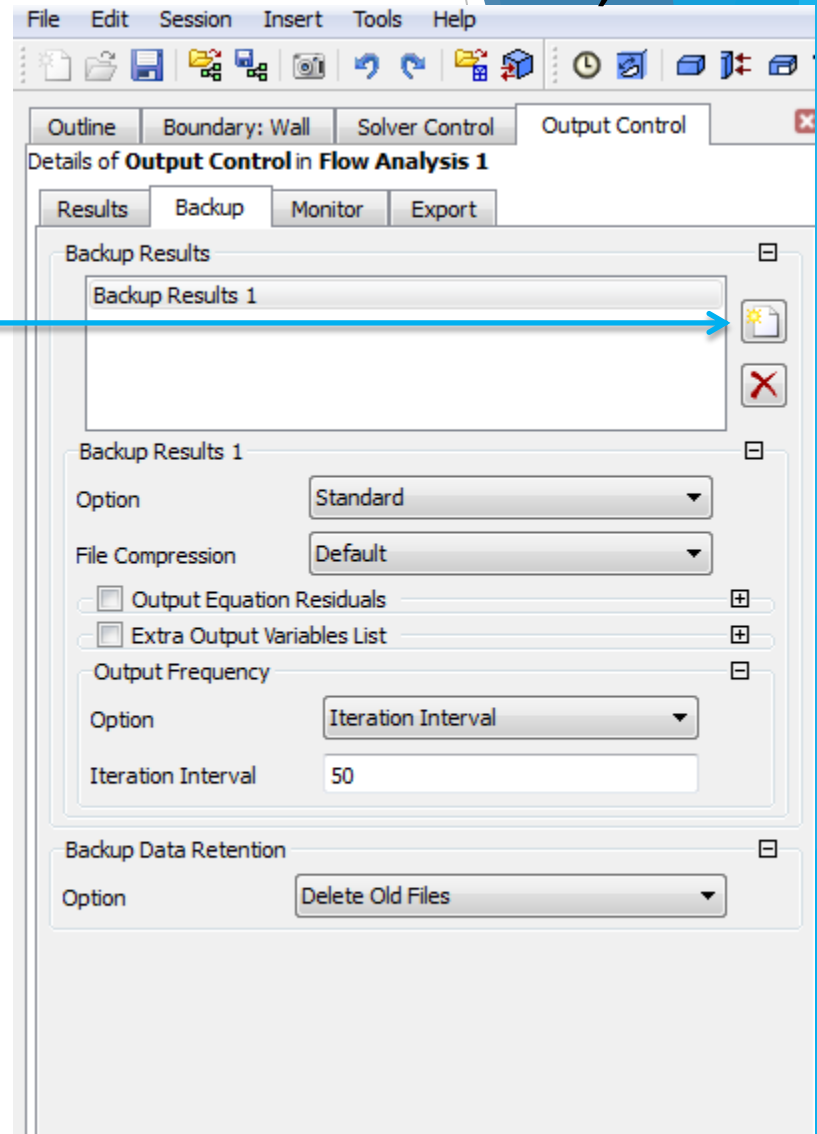
Utilize agora um Timescale Factor de 7.5 para acelerar a convergência

Modelagem Matemática: Setup Caso 2: detalhes numéricos (mesmos do caso 1)

► Detalhes numéricos:

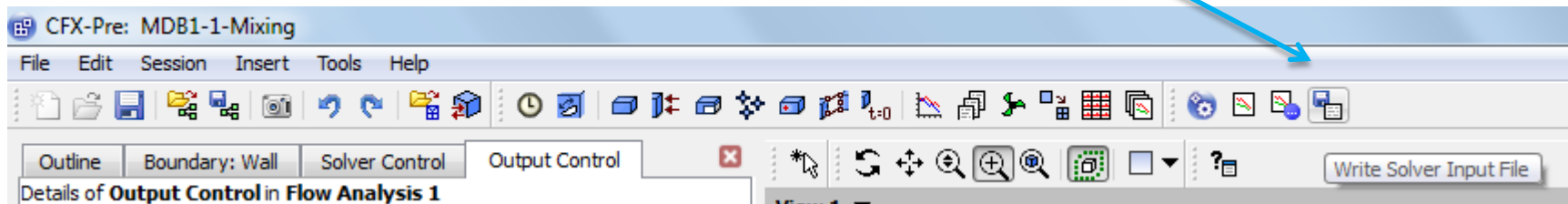
- Duplo clique em Output Control
- Aba Backup > Add New Item
- Defina o intervalo para Backup igual a 50, com opção Delete Old Files

Isto é, a simulação fará um Backup a cada 50 iterações, deletando sempre o arquivo anterior (minimiza o espaço ocupado no HD)



Modelagem Matemática: Setup Caso 2: detalhes numéricos

- ▶ **Salva o arquivo de definição (.def):**
- ▶ No ícone Write Solver Input File

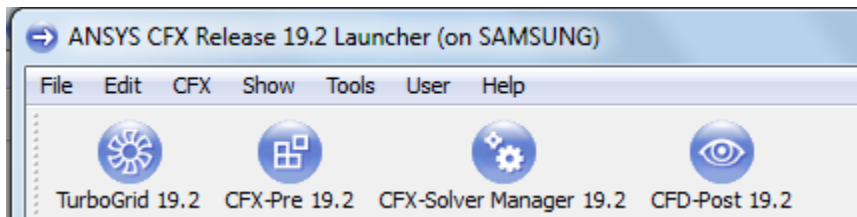


- ▶ Salve o arquivo .def na pasta desejada (ex. MDB-RQ50.def).

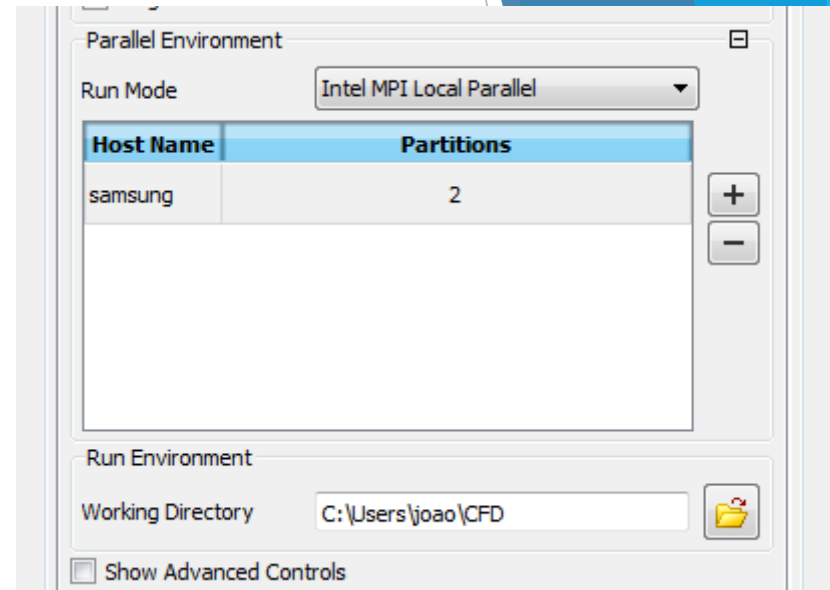
Não utilize acentos, espaços e caracteres especiais no nome do arquivo e nem nas pastas/caminho até onde o arquivo está salvo.

Processamento (Solver)

- ▶ Abra o CFX-Solver Manager 19.2, pelo launcher:



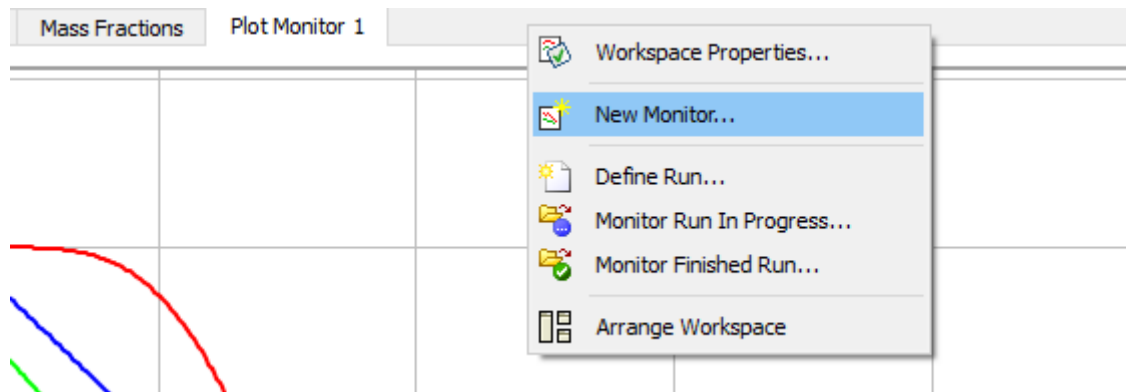
- ▶ File > Define Run
- ▶ Em Solver Input File, abra o .def salvo anteriormente (MDB-RQ50.def)
- ▶ Parallel Environment > Run mode > Intel MPI Local Parallel:
Partitions = 2
- ▶ Em Working Directory define-se onde os dados serão salvos



Desta forma, a simulação irá rodar particionada em 2 processadores (mais partições podem ser adicionadas conforme a configuração do hardware usado)

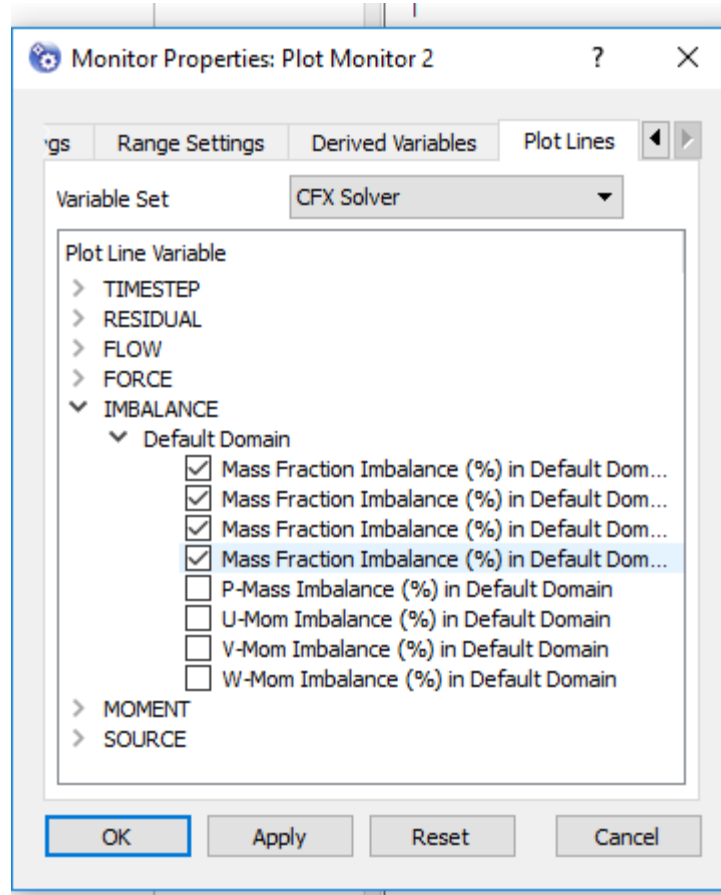
Processamento (*Solver*)

- ▶ A simulação apresenta boa convergência, levando mais de 500 iterações para atingir os resíduos alvo.
- ▶ Pode-se criar novos monitores durante a simulação, por exemplo, para o Imbalance das espécies:
- ▶ Clique com o direito nas abas de monitoramento > New Monitor > OK



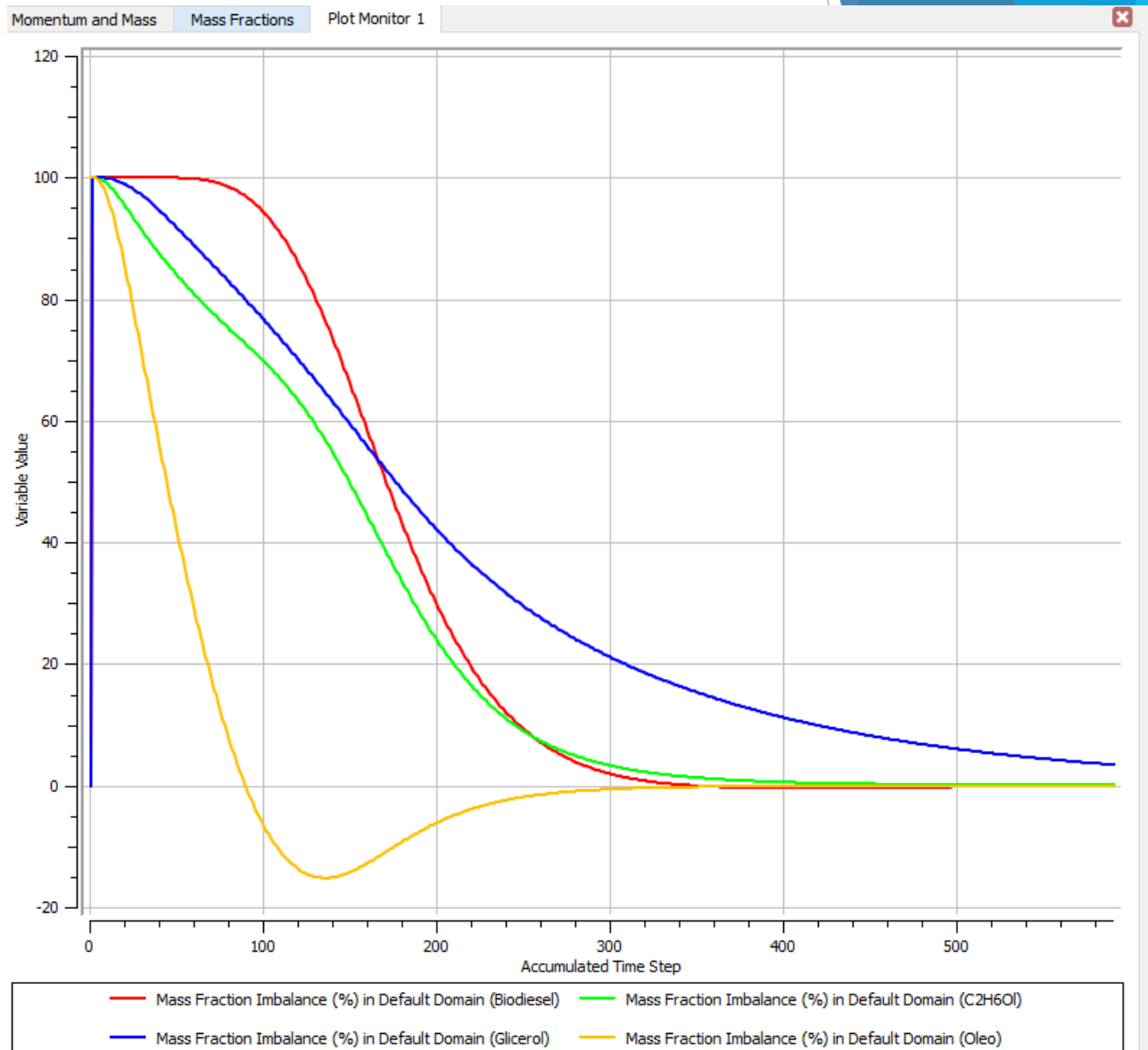
Processamento (Solver)

- ▶ Clique em Imbalance e marque as caixas das frações mássicas:



Processamento (Solver)

- Note que para este caso, após 500 iterações, o balanço do Glicerol ainda não fechou (dentro do 0.01 do Conservation Target), mas apresenta boa tendência de convergência.



Pós-Processamento

- Analisaremos a conversão do óleo (TG):

$$\text{Conversão do Óleo (\%)} = \left(\frac{C_{TG_0} - C_{TG_f}}{C_{TG_0}} \right) \times 100$$

- Sendo C_{TG} a concentração molar do triglicerídeo, e os subscritos 0 e f, na entrada e saída do reator, respectivamente.
- A concentração de entrada pode ser obtida diretamente na superfície de contorno correspondente, desde que está é uma condição de contorno prescrita.
- Para a saída (concentração é resultado da simulação), deve-se criar um plano de maneira similar ao caso 1.

Pós-Processamento

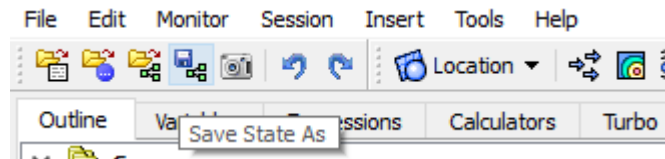
▶ Plano transversais no canal – final do canal:

- Location > Plane: Name Plane 1 > OK
- Method: YZ Plane
- $X = 21 \text{ [mm]}^*$
- Demais parâmetros inalterados
- Apply

* Evite pegar os resultados nas superfícies das condições de contorno, pois se a variável for prescrita, (valor definido no setup), está poderá influenciar o valor lido.

Pós-Processamento

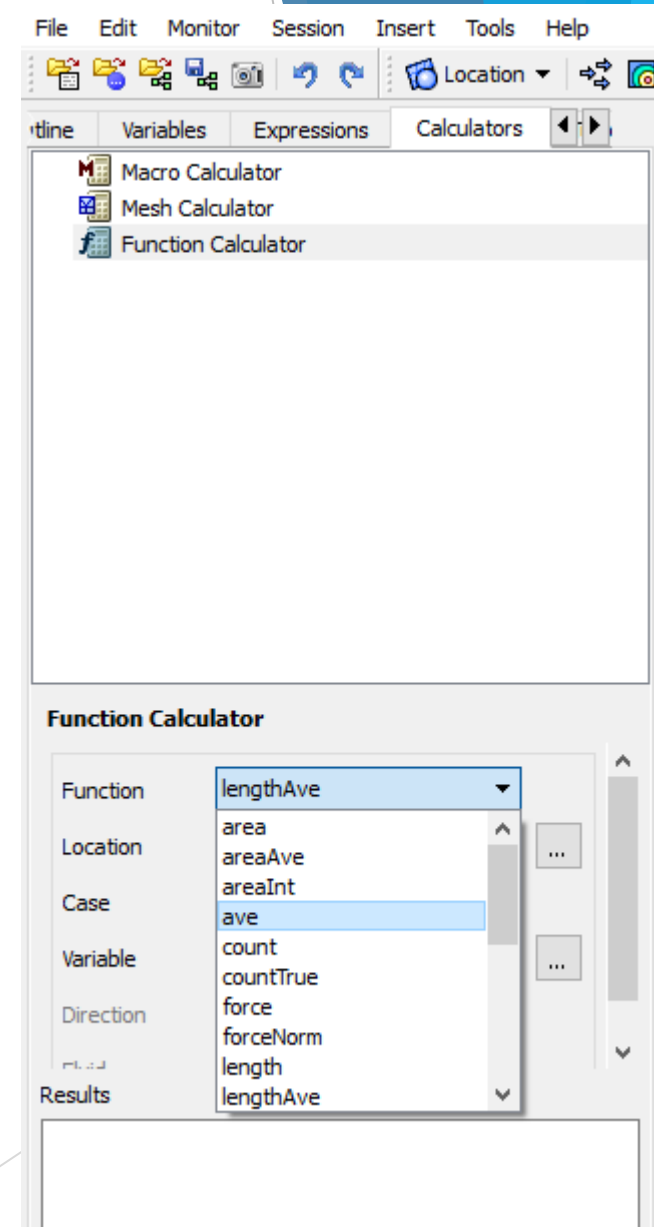
- **Dica:**
- Para evitar ficar sempre refazendo os planos/linhas de corrente (i.e., qualquer visualização de pós-processamento), salve um arquivo de estado (.cst)
- Arquivo .cst será válido para qualquer caso com a mesma geometria.
- File > Save State As...
- Ou clique no ícone:



Pós-Processamento

- Calculator do CFD Post:
 - Aba Calculators, clique duplo em Function Calculator
 - Function: ave (calcula a média da variável)
 - Location: Inlet 2
 - Variable: Sunflower Oil.Molar Concentration
 - Clique em Calculate

Ou seja, a função calcula a média da concentração do óleo no plano correspondente a entrada 2



Pós-Processamento

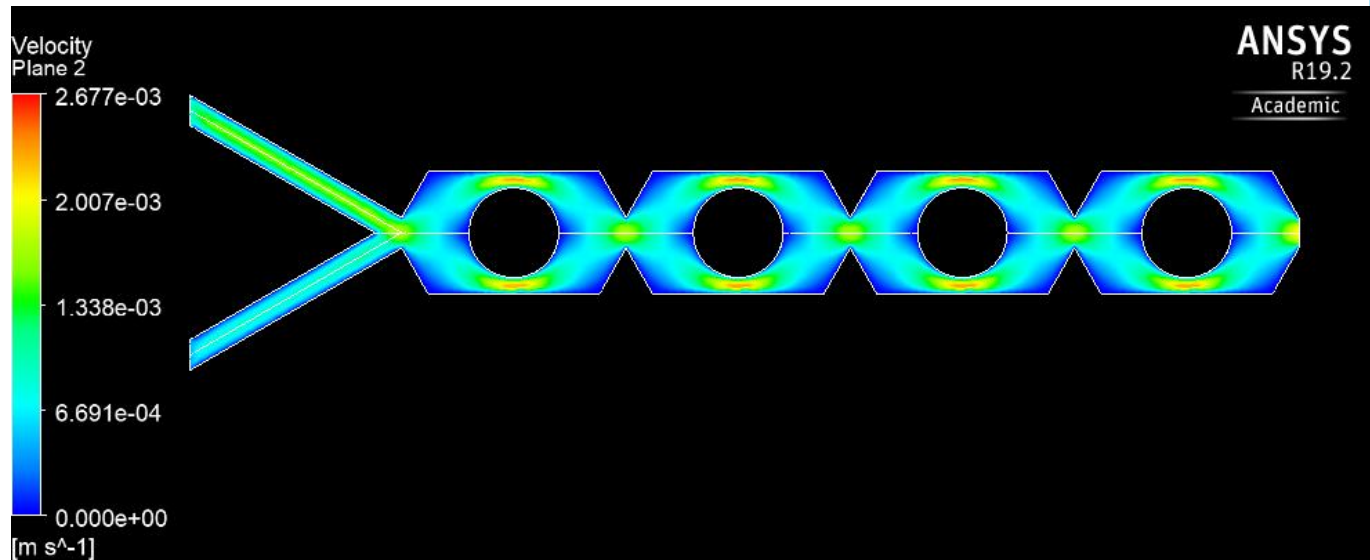
- Calculator do CFD Post:
 - Repita o procedimento, selecionado o Plane 1.
 - Para o exemplo, tem-se (C_{TG} em mol/m³):

$$\begin{aligned}\text{Convers\~ao do \u00d3leo (\%)} &= \left(\frac{C_{TG_0} - C_{TG_f}}{C_{TG_0}} \right) \times 100 \\ &= \left(\frac{450,069 - 44,765}{450,069} \right) \times 100 = 90\%\end{aligned}$$

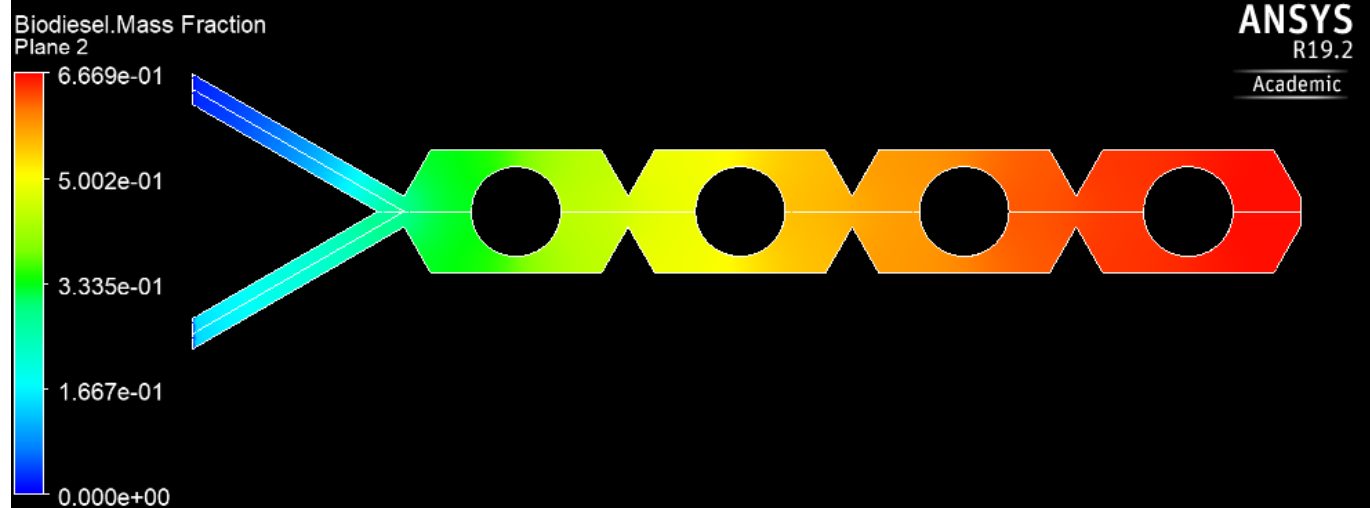
Pós-Processamento

- Análise qualitativa do campo de escoamento (plano axial central)

Velocidade



Distribuição
de biodiesel



Referências e Links Úteis

- ▶ Celik, I. B., Ghia, U., Roache, P. J., Freitas, C. J., Coleman, H., & Raad, P. E. (2008). Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications. **Journal of Fluids Engineering**, 130, 078001-1–4. (Método GCI)
- ▶ Marjanovic, A.V.; Stamenkovic, O.S.; Todorovic, Z.B.; Lazic, M.L.; Veljkovic, V.B. Kinetics of the base-catalyzed sunflower oil ethanolysis. **Fuel**, 89, (2010), 665-671. (Dados cinéticos)
- ▶ Manuais do Ansys CFD:
 - https://www.sharcnet.ca/Software/Ansys/17.0/en-us/help/ai_sinfo/cfx_intro.html