ENCIT 96

LATCYM 96

I

ENCIT 96

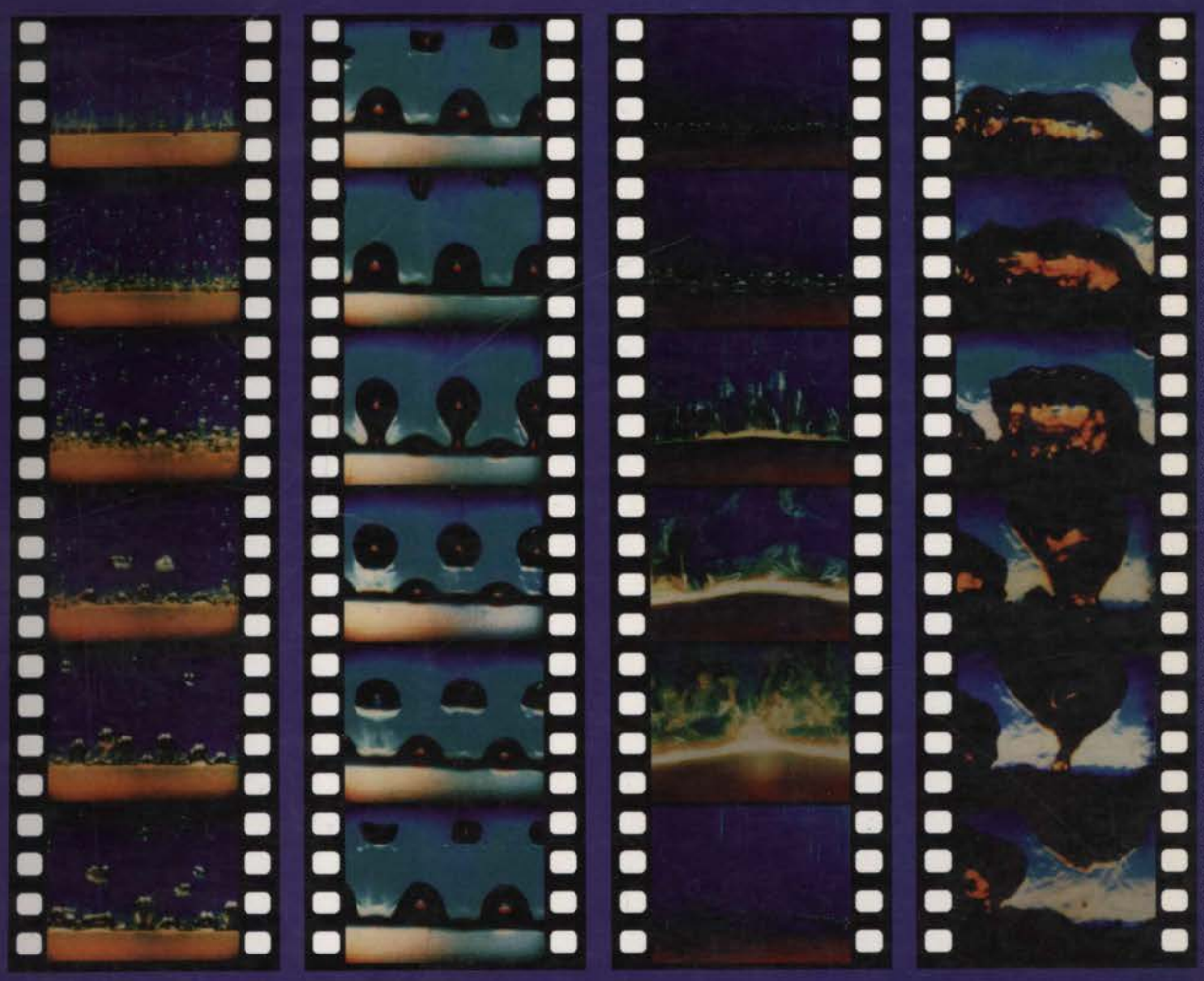
LATCYM 96

PROCEEDINGS OF THE

BRAZILIAN CONGRESS OF ENGINEERING AND THERMAL SCIENCES

6th

LATIN AMERICAN CONGRESS OF HEAT AND MASS TRANSFER



Images extracted from the motion picture "MECANISME DE L'EBULLITION" produced by SFRS (Service du Filme de Recherche Scientifique) Paris/France

FLORIANÓPOLIS / SC
BRAZIL
November 11th - 14th, 1996

VOLUME I

ENCIT 96

LATCYM 96

PROCEEDINGS

VI CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS

VI BRAZILIAN CONGRESS OF ENGINEERING AND THERMAL SCIENCES

VI CONGRESO LATINOAMERICANO DE TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA

VI LATIN AMERICAN CONGRESS OF HEAT AND MASS TRANSFER

VOLUME I

Florianópolis SC, November 11th - 14th 1996

Associação Brasileira de Ciências Mecânicas

UFSC Departamento de Engenharia Mecânica

Universidade Federal de Santa Catarina

Promoted by

Universidade Federal
de Santa Catarina

ABCM

Associação Brasileira de Ciências Mecânicas

UFSC DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Sponsors

GOVERNO DE SANTA CATARINA

Secretaria de Estado de Governo
FUNCITEC

finep

Financiadora de Estudos e Projetos

CNPq

Conselho Nacional de Desenvolvimento
Científico e Tecnológico

FIESC
IEL

Instituto Euvaldo Lodi

BR PETROBRAS

Embraco

aspera

MULTIBRAS SA
ELETRODOMÉSTICOS

Consul BRASTEMP semer

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE CIÊNCIAS MECÂNICAS - ABCM
(BRAZILIAN SOCIETY OF MECHANICAL SCIENCES)

Presidente: Carlos A. de Almeida
Vice-Presidente: Arthur P. Ripper Neto
Secretário Geral: Hans I. Weber
Secretário: Paulo Batista Gonçalves
Diretor de Patrimônio: Felipe B. de Freitas Rachid

COMITÊ DE CIÊNCIAS TÉRMICAS DA ABCM
(THERMAL SCIENCE COMMITTEE - ABCM)

Antonio Fábio Carvalho da Silva
Cláudio Melo
Durval Duarte Jr.
Leonardo Goldstein Jr.
Luis Fernando Alzuguir Azevedo
Luiz Augusto Horta Nogueira
Silvio de Oliveira Jr.

CENTRO LATINOAMERICANO DE TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA
(LATIN AMERICAN CENTER FOR HEAT AND MASS TRANSFER)

Presidente: Claudio Olivera-Fuentes
Secretário: Alvaro Toubes Prata

CONFERENCE ORGANIZING COMMITTEE

Alvaro Toubes Prata
Antonio Carlos Ribeiro Nogueira
Antonio Fábio Carvalho da Silva
César José Deschamps
Cláudio Melo
Clóvis Raimundo Maliska
José Antonio Bellini da Cunha Neto
Júlio César Passos
Narciso Angel Ramos Arroyo
Paulo César da Silva Jucá
Vicente de Paulo Nicolau

Secretary

Eduardo Barbosa Bessa
Gabriel Iwamoto

COORDINATORS OF THE REVIEWING PROCESS AT EACH RESEARCH INSTITUTION

Abimael F. Dourado Loula - LNCC

Álvaro L. G. A. Coutinho - PEC/COPPE

Antônio McDowell de Figueiredo - PEM/COPPE

Demerval J. M. Sartori - UFSCar

Fernando Eduardo Milioli - EESC/USP

Gilmar Guimarães - UFU

Giulio Massarani - PEQ/COPPE

Horácio Antônio Vielmo - UFRGS

João Andrade de Carvalho Jr. - INPE

José Maurício Gurgel - UFPb

José Luiz A. da Fontoura Rodrigues - UnB

Jurandir Itizo Yanagihara - EPUSP

Leonardo Goldstein Jr. - FEM/UNICAMP

Luciano C. M. Varejão - UFES

Luís Fernando A. Azevedo - PUC/RJ

Luiz Augusto Horta Nogueira - EFEI

Marcelo José dos Santos Lemos - ITA/CTA

Márcio Ziviani - UFMG

Milton Mori - FEQ/UNICAMP

Paulo Moraes Jr. - IAE/CTA

Pedro Carajilescov - UFF

Selene M. A. Guelli Ulson de Souza - ENQ/UFSC

REFEREES

Abimael Fernando Dourado Loula - LNCC
Afonso Henriques Moreira Santos - EFEI
Agenor Furigio Júnior - UFSC
Alain Marie B. Passerat de Silans - UFPb
Alcir de Faro Orlando - PUC/RJ
Aldo João de Sousa - UnB
Algacyr Morgenstern - CTA/IAE
Álvaro L. G. de A. Coutinho - UFRJ/COPPE/PEC
Álvaro Toubes Prata - UFSC
Ana Maria da Silveira - UFSCar
Ângela O. Nieckele - PUC/RJ
Antônio Augusto Ulson de Souza - UFSC
Antônio Carlos Bannwart - UNICAMP/FEM
Antônio Carlos Luiz Lisboa - UNICAMP/FEQ
Antônio Carlos Ribeiro Nogueira - UFSC
Antônio César Pinho Brasil Jr. - UnB
Antônio Fábio Carvalho da Silva - UFSC
Antônio Francisco Parentes Fortes - UnB
Antônio M. de Figueiredo - UFRJ/COPPE/PEM
Antônio Moreira dos Santos - USP/São Carlos
Antônio Pralon Ferreira Leite - UFPb
Antônio S. Vargas - PUC/RJ
Araí A. Bernardez Pécora - UNICAMP/FEM
Aristeu Silveira Neto - UFU
Arlindo Tribess - EPUSP
Armando Caldeira Pires - IST/Portugal
Arnaldo C. da Silva Walter - UNICAMP/FEM
Arno Bollmann - UFSC
Arno Krenzinger - UFRGS
Augusto César Galeão - LNCC
Augusto Nélson Viana Carvalho - EFEI
Caio Glauco Sanchez - UNICAMP/FEM
Carlos A. Carrasco Altemani UNICAMP/FEM
Carlos Alberto Gaspareto - UNICAMP/FEQ
Carlos Alfredo Clezar - UFSC
Carlos Antônio Cabral dos Santos - UFPb
Carlos Chien Ching Tu - EPUSP
Celso Peres Fernandes - UFSC
César Costapinto Santana - UNICAMP/FEQ
César José Deschamps - UFSC
César Otaviano Ribeiro Negrão - UFSC
Cezar W. de Almeida Thober - UFRGS
Cirus M. Hackenberg - UFRJ/COPPE/PEQ
Cláudio Alberto Torres Suazo - UFSCar
Cláudio Melo - UFSC
Clovis Raimundo Maliska - UFSC
Clóvis Sperb de Barcellos - UFSC
Cristiano P. Borges - UFRJ/COPPE/PEQ
Demétrio Bastos Netto - INPE
Denis José Schiozer - UNICAMP/FEM
Dermeval José Mazzini Sartori - UFSCar
Douglas Lauria - EPUSP
Edgard Nobuo Mamiya - UnB
Edson Bazzo - UFSC
Edson Luiz Zaparoli - CTA/ITA
Eduardo Alberto Fancello - UFSC
Eduardo Bauzer Medeiros - UFMG
Eduardo Lúcio Mendes Garcia - LNCC
Élcio Nogueira - UNIVAP
Elias Basile Tambourgi - UNICAMP/FEQ
Elson Magalhães Toledo - LNCC
Elyas Ferreira de Medeiros - CTA/IAE
Emerson de Freitas Jaguaribe - UFPb
Ênio Bueno Pereira - UFSC
Euclides Carvalho Fernandes - CTA/ITA
Euclides José Bonet - UNICAMP/FEM
Eugene Uwimana - UFU
Eugênio Spanó Rosa - UNICAMP/FEM
Fábio Santana Magnani - UFSC
Felipe Bastos de Freitas Rachid - UFF
Fernando de Almeida França - UNICAMP/FEM
Fernando Eduardo Milioli - USP/São Carlos
Fernando Fachini Filho - INPE
Fernando Oscar R. Pereira - UFSC
Fernando Ribeiro - UFRJ/COPPE/PEC
Florência Cecília Menegalli - UNICAMP/FEA
Francisco Antônio Belo - UFPb
Francisco Eduardo Mourão Saboya - UFF
Francisco José Simões - UFPb
Francisco Marcondes - UFPb
Francisco Ricardo da Cunha - UnB
Frederico da Cunha Furtado - UNICAMP/IMECC

Genésio José Menon - EFEI
Geraldo Augusto Campolina França - UFMG
Geraldo Lúcio Tiago Filho - EFEI
Gilmar Guimarães - UFU
Gioyanni Brunello - EPUSP
Giulio Massarani - UFRJ/COPPE/PEQ
Gustavo Cesar R. Bodstein - UFRJ/COPPE/PEM
Gustavo Paim Valenca - UNICAMP/FEQ
Hélcio Rangel B. Orlande - UFRJ/COPPE/PEM
Hélio José Correa Barbosa - LNCC
Heraldo da Silva Couto - INPE
Horácio Antônio Vielmo - UFRGS
Humberto Jorge José - UFSC
Humberto Riella - UFSC
Jayme Pinto Ortiz - EPUSP
Jerzy T. Sielawa - INPE
João Andrade de Carvalho Jr. - INPE
João Luis Filgueiras Azevedo - CTA/IAE
João Nildo de Souza Vianna - UnB
João Nisan Correia Guerreiro - LNCC
João Roberto Barbosa - CTA/ITA
Jorge Isaias Llagostera Beltran - UNICAMP/FEM
Jorge Ninow - UFSC
José A. dos Reis Parise - PUC/RJ
José Antônio Bellini da Cunha Neto - UFSC
José Antônio Ribeiro de Souza - UFSC
José Bezerra Pessoa Filho - CTA/IAE
José Gobbo Ferreira - INPE
José Karam Filho - LNCC
José Luiz Alves da Fontoura Rodrigues - UnB
José Luiz Drumond Alves - UFRJ/COPPE/PEC
José Luiz Fontes Monteiro - UFRJ/COPPE/PEQ
José Maria Saiz Jabardo - USP/São Carlos
José Maurício Gurgel - UFPb
José Ricardo Figueiredo - UNICAMP/FEM
José Ricardo Sodré - PUC/RJ
José Roberto Cardoso - EPUSP
José Roberto Nunhez - UNICAMP/FEQ
José Roberto Simões Moreira - EPUSP
José Tomaz Vieira Pereira - UNICAMP/FEM
José Vladimir - UFRJ/COPPE/PEQ
Júlio César Passos - UFSC
Júlio Romano Meneghini - EPUSP
Jurandir Itizo Yanagihara - EPUSP
Kamal Abdel Radi Ismail - UNICAMP/FEM
Katia Tannous - UNICAMP/FEQ
Keiko Wada - UFRGS
Leon R. Sinay - INPE
Leonardo Goldstein Júnior - UNICAMP/FEM
Leonel Teixeira Pinto - UFSC
Leopoldo Eurico G. Bastos - UFRJ/COPPE/PEM
Lígia Damasceno Ferreira Marczak - UFRGS
Luciano Varejão - UFES
Lúcio Renó Benedito Salomon - UnB
Luis Felipe Mendes de Moura - UNICAMP/FEM
Luís Fernando Alzuguir Azevedo - PUC/RJ
Luis Flávio Zorzetto - UNICAMP/FEQ
Luiz Augusto Horta Nogueira - EFEI
Luiz Fernando Milanez - UNICAMP/FEM
Lutero Carmo de Lima - UFU
Manoel E. Carvalho Cruz - UFRJ/COPPE/PEM
Mara G. Novy Quadri - UFSC
Marc Joseph Marie Mulkens - UFU
Marcelo Amorim Savi - UnB
Marcelo José Santos de Lemos - CTA/ITA
Marcelo Krajnc Alves - UFSC
Marcelo Moreira Ganzarolli - UNICAMP/FEM
Márcia E. Mantelli - UFSC
Márcio Bueno dos Santos - INPE
Márcio Fonte-Boa Cortez - UFMG
Márcio Ziviani - UFMG
Marco Antônio M. Silva Ramos - UFF
Marco Antônio Rosa Nascimento - EFEI
Marco Aurélio Cremasco - UNICAMP/FEQ
Marco T. M. B. De Vilhena - UFRGS
Marcos Aurélio Ortega - CTA/ITA
Marcos S. de Paula Gomes - PUC/RJ
Marcus A. V. Duarte - UFU
Marcus Vinícius Bortolus - UFMG
Mardson Queiroz McQuay - BYU/USA
Maria Clara Filippini Ierardi - UNICAMP/FEM
Maria do Carmo Ferreira - UFSCar
Maria Laura Martins Costa - UFF
Maria Regina Wolf Maciel - UNICAMP/FEQ
Marintho Bastos Quadri - UFSC
Mauri Fortes - UFMG
Mauro Esperanza Neto - PUC/RJ
Meuris Gurgel Carlos da Silva - UNICAMP/FEQ

Mikhail Mikhailov - UFRJ/COPPE/PEM
Milton Biage - UFU
Milton Mori - UNICAMP/FEQ
Miriam Rocchi Tavares - EPUSP
Mônica Feijó Naccache - PUC/RJ
Narciso Angel Ramos Arroyo - UFSC
Nísio de C. Lobo Brum UFRJ/COPPE/PEM
Nivaldo Cabral Kuhnen - UFSC
Orosimbo A. de Almeida Rego - UFU
Osvair Vidal Trevisan - UNICAMP/FEM
Oswaldir Taranto - UNICAMP/FEQ
Paulo A. B. de Sampaio - UFRJ/COPPE/PEC
Paulo Afonso de Oliveira Soviero - CTA/ITA
Paulo Bordoni - LNCC
Paulo César da Silva Jucá - UFSC
Paulo César Philippi - UFSC
Paulo de Barros Correia - UNICAMP/FEM
Paulo de Tarso Rocha de Mendonça - UFSC
Paulo Gomes - PUC/RJ
Paulo Ignácio Fonseca de Almeida - UFSCar
Paulo L.C. Lage - UFRJ/COPPE/PEQ
Paulo Moraes Júnior - CTA/IAE
Paulo Roberto de Souza Mendes - PUC/RJ
Paulo S. Schneider - UFRGS
Paulo Seleghim Júnior - USP/São Carlos
Pedro A. N. Bernardini - UFSC
Pedro Carajilescov - UFF
Philemon M. Cunha - PUC/RJ
Pio Caetano Lobo - UFPb
Pradeep Kumar Bansal - UFSC
Rahoma Sadik Mohamed - UNICAMP/FEQ
Ramon Molina Valle - UFMG
Regina Célia Cerqueira de Almeida - LNCC
Regina F. P. Muniz Moreira - UFSC
Reginaldo Guirardello - UNICAMP/FEQ
Renata Crespo - UFES
Renato Machado Cotta - UFRJ/COPPE/PEM
Renato Simões Silva - LNCC
Ricardo Fortes de Miranda - UFU
Ricardo Nicolau Nassar Koury - UFMG
Roberto da Mota Girardi - CTA/ITA
Roberto Guardani - EPUSP
Roberto Lamberts - UFSC
Roger Josef Zem - UNICAMP/FEQ
Rogério José da Silva - EFEI
Rogério Pinheiro Klüppel - UFPb
Rogério Silveira de Queiroz - UFES
Rogério Tadeu da Silva Ferreira - UFSC
Ronaldo Nobrega - UFRJ/COPPE/PEQ
Rosa L. Dias Blanco - UFRGS
Rubens Maciel Filho - UNICAMP/FEQ
Rubens Sampaio - PUC/RJ
Sandra Cristina dos S. Rocha - UNICAMP/FEQ
Sandra Mara Cardoso Malta - LNCC
Saulo Güths - UFSC
Sebastião Varella - EFEI
Selene M. A. Guelli Ulson de Souza - UFSC
Sérgio Colle - UFSC
Sergio Frey - UFF
Sérgio Mourão Saboya - CTA/ITA
Sérgio Pérsio Ravagnani - UNICAMP/FEQ
Sergio Peters - UFSC
Sérgio V. Möller - UFRGS
Severino Rodrigues de Araújo - UFPb
Sílvio de Oliveira Júnior - EPUSP
Simone T. Sebben - UFRGS
Tapan Kumar Sen - EFEI
Theo Guenter Kieckbusch - UNICAMP/FEQ
Tito Livio M. Alves - COPPE/UFRJ/PEQ
Vera Maria M. Martins - UFRJ/COPPE/PEQ
Vicente de Paulo Nicolau - UFSC
Victor Juliano de Negri - UFSC
Vilson Carlos da Silva Ferreira - UFRGS
Waldir Antônio Bizzo - UNICAMP/FEM
Waldir Luiz Ribeiro Gallo - UNICAMP/FEM
Wanyr Romero Ferreira - UFMG
Washington Braga Filho - PUC/RJ
Webe Mansur - UFRJ/COPPE/PEC
Wu Hong Kwong - UFSCar
Zulcy de Souza - EFEI

EDITORIAL

Both the Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences, ENCIT, and the Latin American Congress of Heat and Mass Transfer, LATCYM, are the most important South American events in their field. For the first time these congresses are being held jointly, as a combined effort of both the Brazilian Society of Mechanical Sciences, ABCM, and the Latin American Center for Heat and Mass Transfer, CLATCAMA. The events are being sponsored by the Department of Mechanical Engineering of the Federal University of Santa Catarina.

This edition of the ENCIT is in celebration of the tenth anniversary of the event. The first ENCIT was held in Rio de Janeiro in 1986 after the brazilian thermal science community decided that the Brazilian Congress of Mechanical Engineering, which was the main forum used so far, had become too large to allow a close interaction among the participants and to accommodate the large attendance. Following the ENCIT 86, came ENCIT 88 held in Águas de Lindóia, SP, the ENCIT 90 in Itapema, SC, the ENCIT 92 held again in Rio de Janeiro, and the ENCIT 94 that took place at São Paulo and was organized by the Universidade de São Paulo, USP in conjunction with the Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo, IPT. For ENCIT 96 it was decided that the original name of the Congress, Brazilian Thermal Science Meeting, was no longer reflecting the scope and the size of the event, and was altered to Brazilian Congress of Engineering and Thermal Sciences, keeping the acronym ENCIT.

Traditionally, the LATCYM has been organized by the chemical engineering community, and the first event was held in La Plata, Argentina, in 1982. The second LATCYM was held in São Paulo, Brazil, in 1985. Mexico was the place for the third LATCYM that happened in 1988. The fourth and fifth LATCYM's were held in La Serena, Chile, in 1991, and Caracas, Venezuela, in 1994, respectively. For this edition of the LATCYM, for the first time, the mechanical engineers were invited to sponsor the event.

The result of this joint congress is represented by 331 accepted papers out of 408 submitted manuscripts. Sixty-six technical sessions were planned to accommodate the oral presentation of all the papers, which covered a very large spectrum of topics concentrated in main areas of Chemical and Mechanical Engineering. The proceedings, with 1890 pages divided in three volumes, are an indication of the maturity and the level of technical and scientific excellence acquired by the ENCIT and LATCYM series, and by the latin american community active on applied and fundamental aspects of heat and mass transfer, fluid mechanics and thermodynamics. The large size of this joint congress also indicates that it may be time for creating new conferences or workshops with narrowest scope. It is worth mentioning that, in addition to the large number of papers from research institutions of Latin America, there are several contributions from other countries, mainly Europe and North America.

INVITED SPEAKERS

Stress Power, Dissipation and Variational Principles in Flow of Fluids with Arbitrary Constitutive Equations
Gianni Astarita
Dip. Ingegneria dei Materiali e della Produzione
Universita di Napoli "Frederico II"
ITALY

Some Aspects of Two-Phase Helium Flow
Jean-Marc Delhaye
Comissariat à l'Énergie Atomique/Grenoble
FRANCE

Solid Sorption Devices for CFC-Free Generation of Heat and Cold
Manfred Groll
IKE-Institut für Kernenergetik und Energiesysteme
Universität Stuttgart
GERMANY

Multiphase Flow and Boiling: Predictable or Impossible ?
Geoffrey F. Hewitt
Department of Chemical Engineering
Imperial College of Science, Technology and Medicine
ENGLAND

Monte Carlo Methods in Heat Transfer
John R. Howell
Department of Mechanical Engineering
University of Texas at Austin
USA

Modeling of Fluid Flow in Petroleum Exploration and Production
Oswaldo Antunes Pedrosa Júnior
Superintendente de Exploração de Petróleo
CENPES-Centro de Pesquisas da Petrobrás
BRAZIL

Large-Eddy Simulations and Statistical Turbulence Models: Comparison of their Predictive Abilities
Wolfgang Rodi
Institut für Hydromechanik
Universität Karlsruhe
GERMANY

CONTENTS

VOLUME I

AERODYNAMICS AND GAS DYNAMICS

ESTUDO EXPERIMENTAL DA INCLINAÇÃO DA SUPERFÍCIE FRONTAL EM MODELOS DE ÔNIBUS 1
Orlando Moreira Jr., Roberto M. Girardi.

SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO RETANGULAR COM UMA FRESTA UTILIZANDO O MÉTODO DE VÓRTICES 7
Gustavo C. R. Bodstein, Carlos R. O. L. Roque, Miguel H. Hirata.

FORÇA DE ARRASTO EM CORPOS ROMBUDOS DE FORMAS COMPLEXAS (UTILIZAÇÃO DE LÓGICA FUZZY E ALGORITMOS GENÉTICOS) 13
Vanessa G. Guedes, Leandro P. de Siqueira, Miguel H. Hirata.

SHOCK TUBE PROBLEM WITH HIGH-TEMPERATURE EFFECTS IN EQUILIBRIUM AIR 19
Jorge Koreeda, Shigeki Harada, Hiroki Honma.

MODELAGEM AERODINÂMICA DE TURBINAS EÓLICAS DE PASSO VARIÁVEL 25
Armando L. R. Medeiros.

VISCOUS ANALYSIS OF NUMERICALLY DESIGNED AIRFOILS FOR GENERAL-UTILITY AIRCRAFTS 31
Bento Silva de Mattos.

UM MÉTODO PARAMETRIZADO PARA A DETERMINAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE SUSTENTAÇÃO SOBRE ASAS A PARTIR DA TEORIA DA LINHA SUSTENTADORA 37
Ricardo Luiz Utsch de F. Pinto, Marcos Vinicius Bortolus.

ANÁLISE TEÓRICA DA INFLUÊNCIA DA PAREDE DE UM TÚNEL SOBRE A CURVA DE COEFICIENTE DE COLETA LOCAL 43
Carlos Daniel Ebinuma, Alexandre Testa Varallo.

ANÁLISE NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS EM GRADES LINEARES DE PERFIS PARA VÁRIOS REGIMES DE VELOCIDADE 49
Edson Basso, João L. F. Azevedo.

VLS- AERODINÂMICA DE DECOLAGEM 55
Paulo Moraes Jr..

ANALYTICAL METHODS

SEMI-ANALYTICAL SOLUTION FOR RADIAL STOKES FLOW BETWEEN TWO PARALLEL DISKS 61
Cristina H. Amon, Jauber C. Oliveira.

MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESCOAMENTO LAMINAR PERMANENTE NA REGIÃO DE ENTRADA DE UM DUTO CIRCULAR 67
Sérgio Rodrigues Fontes, Marcius Fantozzi Giorgetti.

A COMPARISON OF INTEGRAL TRANSFORM STRATEGIES FOR SOLVING THE BOUNDARY LAYER EQUATIONS 73
E. F. da Silva, J. S. Pérez Guerrero, R. M. Cotta.

NONSTATIONARY ITERATIVE METHODS APPLIED TO POSITIVE DEFINITE ALGEBRAIC LINEAR SYSTEMS 79
N. R. Santos.

UM MÉTODO NÃO PARAMÉTRICO PARA A DETERMINAÇÃO APROXIMADA DE FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA 85
Miriam Denise Xavier Lazarini, Eduardo Bauzer Medeiros, Marcley L. Pereira.

GENERAL INTEGRAL TRANSFORM SOLUTION OF TWO-DIMENSIONAL LAMINAR BOUNDARY LAYER EQUATIONS 91
Jian Su.

ANÁLISE DO CUSTO COMPUTACIONAL PARA UM MODELAMENTO ANALÍTICO-NUMÉRICO DE CONVECÇÃO 97
Ségio Wortmann, Carlos A. C. Santos.

BOUNDARY ELEMENT METHOD

ANÁLISE DE FLUXOS PARA PROBLEMAS DE POTENCIAL COM O MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN LOCAL MODIFICADO (MLGFM) 103
Renato Barbieri, Pablo Andrés Muñoz Rojas.

UNA FORMULACIÓN DE ELEMENTOS DE CONTORNO PARA LA EVALUACIÓN DE VELOCIDADES DE TRANSFERENCIA DE CALOR ENTRE PARED-PARTÍCULA Y PARTÍCULA-PARTÍCULA EN LECHOS RELLENOS 109
Néstor J. Mariani, Germán D. Mazza, Osvaldo M. Martinez, Guilhermo F. Barreto.

TRATAMIENTO DE PROBLEMAS TERMOELÁSTICOS MEDIANTE UNA NUEVA FORMULACIÓN DEL MÉTODO DE LOS ELEMENTOS DE CONTORNO 113
Gemma Rodríguez, Berardi Sensale, Guillermo J. Creus.

METODO INTEGRAL PARA LA SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS NO LINEALES 121
R. S. Cadoche, E. D. Negri, M. G. Chiovetta.

BUILDING THERMAL BEHAVIOR

NUMERICAL MODELLING OF THE MINI-CLIME IN A SPORTS STADIUM 127
Juan Gabriel Sosa, Eduardo Brizuela, John H. Kent.

INFLUÊNCIA DE LA VENTILACIÓN NATURAL EN LA TEMPERATURA DEL AIRE INTERIOR DE VIVIENDAS: MEDICIONES EXPERIMENTALES 133
María Eugenia Sosa, Luis A. Rosales.

ADVANCED BUILDING PERFORMANCE PREDICTION: AN OVERVIEW OF DEVELOPMENTS IN THE EUROPEAN UNION 139
Paul A. Strachan.

EVALUACION DEL SINDROME DE EDIFICIO ENFERMO APLICANDO UN MODELO FACTORIAL FRACCIONADO SATURADO 145
Luis Miguel Sarache Belandria.

TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA A TRAVES DE UNA PUERTA ABIERTA 149
Adelqui Fissore Sch., Reinaldo Bareyns R.

COOLING LOADS FROM HEAT AND MOISTURE TRANSFER THROUGH POROUS WALLS: SENSITIVITY TO TREATMENT OF TRANSFER COEFFICIENTS IN THE PHILIP & DE VRIES MODEL 155
N. Mendes, F. C. Winkelmann, R. Lamberts, P. C. Philippi, J. A. B. da Cunha Neto, A. Pedrini.

ESTUDO EXPERIMENTAL DO COMPORTAMENTO TÉRMICO DE COBERTURAS PLANAS - VEGETAÇÃO E TERRAÇO 161
Maria Tereza F. Pouey, Miguel Aloísio Sattler, Paulo Smith Schneider.

SIMULATION, BY THE NETWORK METHOD, OF THE HEAT CONDUCTION THROUGH A COMPOSITE WALL, UNDER PERIODIC BOUNDARY CONDITIONS 167
F. Alhama, J. F. López Sánchez, M. Alarcón, C. F. Gonzáles-Fernandez.

DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES RELACIONADAS À TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM TELHAS CERÂMICAS 171
A. D. Bueno, J. A. B. da Cunha Neto.

DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA E DO CONTEÚDO MÁSSICO DE UMIDADE DE TELHAS EXPOSTAS AO MEIO AMBIENTE 177
A. D. Bueno, R. Lamberts, J. A. B. da Cunha Neto.

UM MODELO DE TRANFERÊNCIA DE FLUXO RADIANTE ATRAVÉS DE PERSIANAS HORIZONTAIS EXTERNAS ESPELHADAS 183
Fernando O. Ruttkay Pereira.

COGENERATION AND THERMOELECTRIC GENERATION

RECURSOS NATURAIS DE ENERGIA 189
Paulo César da Costa Pinheiro.

ANÁLISE DE PARÂMETROS TERMODINÂMICOS DE DESEMPENHO E DE MÉTODOS DE ALOCAÇÃO DE CUSTOS EM SISTEMAS DE COGERAÇÃO EQUIPADOS COM TURBINAS DE CONTRAPRESSÃO 195
Arnaldo C. S. Walter, Jorge Llagostera, Waldyr L. R. Gallo.

LA INCIDENCIA DE LA TRANSFERENCIA TÉRMICA ENTRE FLUIDOS INTERMEDIARIOS EN LA EFICIENCIA DE UN CICLO COMBINADO 201
Alberto Fushimi, Julio Mestroni.

ANÁLISE EXERGÉTICA E ECONÔMICA DE PLANTAS TÉRMICAS SOB CONDIÇÕES DE INCERTEZA 207
Roberto A. Almeida, Afonso Henriques Moreira Santos, Edson C. Bortoni.

TERMOECONOMIA APLICADA A MANUTENÇÃO DE CENTRAIS TERMELÉTRICAS 213
Fabiano da Rosa Carvalho, Luiz Augusto Horta Nogueira.

COMBUSTION

INFLUÊNCIA DE PARÂMETROS DE ATOMIZAÇÃO NA COMBUSTÃO DE SPRAYS EM COMBUSTORES TIPO TUBO DE RIJKE 219
Pedro T. Lacava, João A. de Carvalho Jr., Mardson Q. McQuay.

EFFECT OF PRESSURE ON SINGLE PARTICLE COMBUSTION RATE 225
Carlos A. Gurgel Veras, João A. de Carvalho Jr., Jaakko Saastamoinen.

MODELACIÓN DE UN COMBUSTOR DE CARBÓN PULVERIZADO USANDO LA METODOLOGIA DE VOLÚMENES FINITOS 231
Juan Moreno, A. Barrientos, J. Pares.

DISTRIBUIÇÃO DE GOTAS FORMADAS POR JATOS MÚLTIPLOS NÃO COPLANARES 237
H. S. Couto, J. A. Carvalho Jr., D. Bastos-Neto.

HIGH PRESSURE DROPLET BURNING EXPERIMENTS IN REDUCED GRAVITY 243
B. Vieille, C. Chaveau, A. Odeïde, I. Gökalp.

MODELAGEM DA VAPORIZAÇÃO DE ÁGUA NEBULIZADA EM SISTEMAS DE PROTEÇÃO CONTRA INCÊNDIO 247
Rubens Romani, Jurandir I. Yanagihara.

OBTENÇÃO DA TAXA DE REGRESSÃO VOLUMÉTRICA DE GRÃOS DE PÓLVORA ATRAVÉS DE RESULTADOS DE TESTES CONVENCIONAIS EM BOMBA MANOMÉTRICA 253
A. G. de Oliveira Filho, P. L. C. Lage.

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE ZONAS PARA PREVISÃO DE CONDIÇÕES OPERACIONAIS DE INCINERADOR 259
Francisco Domingues Alves de Sousa, Laiete Soto Messias, Wilian T. Kobayashi.

ACOUSTICAL AND LDV VELOCITY MEASUREMENTS ON PREMIXED FLAMES: INVESTIGATION OF COMBUSTION FLICKERING AT DIFFERENT REYNOLDS NUMBERS 265
N. Paone, Gian Marco Revel, E. P. Tomasini.

BURNING RATE AND TURBULENT BURNING VELOCITY OF PREMIXED TURBULENT FLAMES IN STAGNATION FLOWS 271
E. Bourguignon, Y. Michou, I. Gökalp.

EFEITOS DA VARIAÇÃO DE DENSIDADE EM CHAMAS DIFUSIVAS TRANSIENTES 275
Fernando S. Costa, M. Sichel.

MODELAGEM DE PROCESSOS QUÍMICOS DESEQUILIBRADOS E DA EMISSÃO NOx EM CÂMARA DE COMBUSTÃO DE TURBOMOTOR 281
V. G. Krioukov, A. B. Demin, A. L. Abdulline.

ESTUDO DO PROCESSO DE COMBUSTÃO DE QUEROSENE EM AR EM CONDIÇÕES DE ESTABILIZAÇÃO AERODINÂMICA DA CHAMA 287
Oleg. A. Khatchatourian.

NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT DIFFUSION FLAMES USING A 4-STEP MECHANISM 293
Victoria Echaniz, Samantha Lodi, Eduardo Brizuela, Robert W. Bilger.

DRYING

MODELAGEM DOS PROCESSOS EM FORNALHAS UTILIZANDO COMBUSTÍVEIS VEGETAIS PARA SECAGEM DE GRÃOS 299
V. Krioukov, L. Dalabrida, S. Dalepiane.

COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN PROCESOS DE SECADO CON VAPOR RECALENTADO DIRECTO 305
P. I. Alvarez, R. Blasco.

AVALIAÇÃO DO PROCESSO DE SECAGEM DE MADEIRA COM AQUECIMENTO EM AMBIENTE SATURADO 309
José A. B. da Cunha Neto, Sandro Keine.

SIMULAÇÃO DE SECADORES REAIS BIDIMENSIONAIS 315
J. L. F. Souza, W. R. Ferreira.

SIMULAÇÃO DE SECADORES TIPO TÚNEL 321
V. M. S. Santos, W. R. Ferreira.

ESTUDO PRELIMINAR SOBRE A SECAGEM DE MEIOS CAPILARES 327
L. A. Calçada, M. G. G. Mazza, G. Massarani.

ESTUDO TEÓRICO DA CONVECÇÃO EM SECADORES SUBMETIDOS A ESCOAMENTO PULSANTE E PERMANENTE 333
S. L Fraenkel, L. A. Horta Nogueira, J. A. de Carvalho Júnior.

LAMINAR FORCED HEAT AND MASS TRANSFER AROUND A CYLINDER UNDER DRYING CONDITIONS 339
M. Fortes, W. F. Ferreira, A. A. Barreto.

MATHEMATICAL MODELLING OF AN INDIRECT CONTACT ROTARY DRYER: EFFECT OF THE DRYING KINETICS 345
Pedro I. Alvarez, C. Shene.

CONJUGATE CONVECTIVE DRYING OF MULTIPARTICLE SYSTEMS 349
Leandro Soares de Oliveira, Kamyar Haghighi.

ENGINEERING AND THERMAL SCIENCE EDUCATION

ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE ACTIVO DE LOS FUNDAMENTOS DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA 355
Enrique Albizzati, Alicia Arese, Diana Estenoz, Germán Rossetti.

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DE CONTROLE PID POR COMPUTADOR PARA BANHO TERMOSTATO - TROCADOR DE CALOR (CASCO-SERPENTINA) 359
Luiz Fernando M. de Santana, Roberto de Sousa, Ari José C. Pereira.

MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS APLICADO A CAMADA LIMITE: UMA ABORDAGEM EDUCACIONAL USANDO O *MATHEMATICA*® 365
Eugênio S. Rosa, Vicente L. Scalon, Ricardo A. Mazza.

ENVIRONMENTAL FLOWS

INFLUÊNCIA DA ALTURA EFETIVA DA PLUMA EM MODELOS DE ESTIMATIVA DE DISPERSÃO DE POLUENTES 371
Márcio Dimas Ramos, Genésio José Menon, Rogério José da Silva.

COMPARAÇÃO ENTRE SOLUÇÃO NUMÉRICA E UMA SOLUÇÃO EXATA CONDICIONADA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ATMOSFÉRICA 377
Rogério Silveira de Queiroz, Hermes Vazzoler Júnior, Maxsuel M. Rocha Pereira.

TURBULENT WATER CHANNEL FLOWS UNDER SURFACE WIND ACTION 383
Paulo C. S. Jucá, C. R. Maliska.

A FINITE ELEMENT MODEL BASED ON THE SUPG METHOD FOR SHALLOW WATER WAVES 389
Carlos Carbonel H., Augusto C. N. Galeão, Abimael D. Loula.

EQUIPMENTS, PROCESSES AND THERMAL SYSTEMS

MODELAMENTO MATEMÁTICO DO AQUECIMENTO DE BARRAS CILÍNDRICAS EM UM FORNO DE SOLEIRA ROTATIVA 395
Ledomiro Braga da Silva, Márcio Ziviani.

VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DE MODELO SIMPLIFICADO DE CALDEIRAS DOMÉSTICAS A COMBUSTÍVEL LÍQUIDO 401
Jaime Roberto Teixeira Rios, O. S. Hernandez.

ESTUDIO DEL PROCESO DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN COCINAS A BRIQUETAS DE CARBÓN 405
Estela de La Gracia Assureura E.

AVALIAÇÃO DE UM FORNO INTERMITENTE DE CERÂMICA VERMELHA USANDO BAGAÇO DE CANA COMO COMBUSTÍVEL 411
Maria Eugenia Corria Aradas, Luís Augusto Barbosa Cortez, Electo Eduardo Silva.

A GENERALIZED ALGORITHM FOR SIMULATION OF THERMAL SYSTEMS 417
Carlos Alberto de Melo, Gustavo L. C. M. de Abreu.

ANÁLISE ECONÔMICA DE CICLOS COM TURBINA A GÁS UTILIZANDO BIOMASSA GASEIFICADA 423
Luis Antonio Bortolaia, Luiz Augusto Horta Nogueira, Marco Antônio Rosa do Nascimento.

EXERGY ANALYSIS AND COGENERATION

REPRESENTATION OF THERMOFLUID SYSTEMS USING TRUE BOND GRAPHS 429
Claudio Olivera-Fuentes, Marisol Delgado.

ANÁLISE DAS DERIVADAS PARCIAIS DA EXERGIA DO VAPOR D'ÁGUA EM RELAÇÃO À PRESSÃO E À TEMPERATURA 435
Jorge Llagostera.

METODOLOGIA ENERGÉTICA COMO FERRAMENTA NO GERENCIAMENTO DE QUALIDADE E PRODUTIVIDADE EM CULTIVOS AGRÍCOLAS 441
Rolando Nonato de Oliveira Lima, José Antônio da Silva, Marcelo Romano Maiello.

ESTUDO DE POSSIBILIDADES DE INCREMENTO DA COGERAÇÃO EM USINAS AÇUCAREIRAS CUBANAS 447
Eduardo Rafael Barreda del Campo, Jorge Llagostera.

ANÁLISE TERMOECONÔMICA DE UM SISTEMA DE COGERAÇÃO DE UMA USINA AÇUCAREIRA CUBANA 453
Eduardo R. Barreda del Campo, Sérgio A. Araújo da Gama Cerqueira, Silvia Azucena Nebra.

AVALIAÇÃO DO POTENCIAL DO USO DE RESÍDUOS INDUSTRIAIS NA PRÁTICA DE COGERAÇÃO 459
Emerson Bravo Stocco, José Antonio Perrella Balestieri.

ANÁLISE EXERGÉTICA DO PROCESSAMENTO PRIMÁRIO DE PETRÓLEO 465
Silvio de Oliveira Junior, Marco Van Hombeeck.

FINITE ELEMENT METHOD

SIMULATION OF CROSS FLOW PAST A TUBE BANK EMPLOYING AN ADAPTIVE PARALLEL/VECTOR FINITE ELEMENT PROCEDURE 471
Paulo A. B. de Sampaio, Alvaro L. G. A. Coutinho.

TRANSIENT THREE-DIMENSIONAL ANALYSIS OF THERMAL FIELD IN STEEL AT HIGH TEMPERATURE VIA GGLS METHOD 477
E. G. D. do Carmo, F. A. O. Q. Braga, P. L. da Nóbrega.

APROXIMAÇÕES DE PROBLEMAS DE CONVECÇÃO DE CALOR VIA METODOLOGIAS ESTABILIZADAS 481
Sérgio Frey.

ON THE ACCURACY OF FINITE ELEMENT SOLUTIONS OF THERMAL PROBLEMS 487
Adriana Silva França, Kamyar Haghighi.

NOVAS FORMULAÇÕES PETROV-GALERKIN PARA ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS. PARTE I: ANÁLISE NUMÉRICA DO PROBLEMA MODIFICADO DE STOKES 493
E. G. D. do Carmo, F. M. L. Traiano, L. C. C. dos Santos.

NOVAS FORMULAÇÕES PETROV-GALERKIN PARA ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS. PARTE II: RESULTADOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA MODIFICADO DE STOKES 499
E. G. D. do Carmo, F. M. L. Traiano, L. C. C. dos Santos.

DESENVOLVIMENTO DE ALGORITMOS DE SUB-ESTRUTURAÇÃO PARA ELEMENTOS FINITOS 505
Philippe R. B. Devloo, Misael L. M. Santana.

REFINAMIENTO DE MALLA ADAPTABLE EN EL METODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS 511
Juan F. Briceño.

FINITE VOLUME METHOD

SOLUTION OF INCOMPRESSIBLE AND COMPRESSIBLE FLUID FLOWS BASED ON RUNGE-KUTTA TIME-STEPPING SCHEMES 517
Alvaro Luiz de Bortoli.

A MARKER-AND-CELL TECHNIQUE FOR SOLVING AXISYMMETRIC FREE SURFACE FLOWS 523
M. F. Tomé, A. Castelo Filho, J.Murakami, J. A. Cuminato.

APPLICATION OF THE OPTIMIZED MODIFIED STRONG IMPLICIT PROCEDURE TO NON-LINEAR PROBLEMS 529
Paulo Laranjeira da Cunha Lage.

ADAPTIVE OPTIMIZATION OF THE MODIFIED STRONG IMPLICIT PROCEDURE FOR LINEAR FIELD PROBLEM SOLUTION 535
Paulo Laranjeira da Cunha Lage.

SIMPLE, SOLA E VORTICIDADE-FUNÇÃO CORRENTE: UM TESTE COMPARATIVO 541
Admilson Teixeira Franco, Ricardo Alan V. Ramos, Marcelo Moreira Ganzarolli.

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS HIPERSÔNICOS UTILIZANDO MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS 547
Heidi Korzenowski, João L. F. Azevedo.

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS COM MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS SOBRE CONFIGURAÇÕES AUTOMOTIVAS BÁSICAS COM UM MÉTODO PARA TODA A FAIXA DE VELOCIDADE 553
João L. F. Azevedo, Wladimyr M. C. Dourado.

UNSTRUCTURED MESH GENERATION: QUALITY ENHANCEMENT THROUGH SMOOTHING 559
Ricardo B. Auada, Julio R. Meneghini.

ANÁLISE DA ACURÁCIA DE APROXIMAÇÃO DO LAPLACIANO EM VOLUMES FINITOS USANDO DIAGRAMAS DE VORONOI 565
Luciano A. Santos, João. F. V. Vasconcellos, Clovis R. Maliska.

MALLAS IRREGULARES EN DIFERENCIA FINITA: ECUACIÓN DE TRANSPORTE TRANSIENTE 571
Luis Fernando Carvajal.

UM ALGORITMO EM VOLUMES FINITOS PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS TRANSÔNICOS COM ONDA DE CHOQUE 577
Ernesto R. Renzani, Angela O. Nieckele.

PARALLEL SOLUTION OF FREE SURFACE FLOWS 583
Jose Alberto Cuminato, Antonio Castelo Filho, Murilo F. Tomé, Maurílio Boaventura.

ESTUDO DE ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS CONVECTIVOS EM ESCOAMENTOS FORTEMENTE NÃO-ESTACIONÁRIOS 589
Marcos V. Bortolus.

ADVANCES IN CFD SOFTWARE FOR HEAT TRANSFER AND COMBUSTION CALCULATIONS 595
Sanjay Mathur, Jayathi Y. Murthy, Dipankar Choudhury.

FLUIDIZED AND SPOUTED BEDS

MODELADO DE REACTORES DE LECHO SUSPENDIDO PARA LA BIODEGRADACION ANAEROBIA DE EFLUENTES LIQUIDOS CON ELEVADA CARGA ORGANICA 601
E. D. Negri.

EFFECTIVE DRAG COEFFICIENTS IN A PNEUMATIC BED WITH A SPOUTED BED TYPE SOLID FEEDING SYSTEM 605
E. M. V. Silva, J. Mazucheli, M. C. Ferreira, J. T. Freire.

DISTRIBUIÇÃO DE PARTÍCULAS EM LEITOS VISCOSOS VIBRO-JORRADOS 611
André G. Pereira, F. Keller, J. R. D. Finzer.

DESEMPENHO TÉRMICO DE REGENERADORES DE CALOR NÃO ADIABÁTICOS 617
Samuel Luporini, João A. F. R. Pereira, Alberto L. de Andrade.

VOLUME II

FOOD SCIENCE AND ENGINEERING

TRANSFERENCIA DE CALOR EN EL HOMOGENEIZADO DE LA MIEL 623
M. Carnero, E. Ducrós, M. Ferrari, A. Lema, A. Peiretti, M. Zilletti, M. Pramparo.

SIMULACION DE PERDIDAS DE NUTRIENTES DURANTE EL SECADO DE PLACAS DE PAPA 629
Clara O. Rovedo, Pascual E. Viollaz.

EXTRACCION DE ACEITE DE GIRASOL USANDO CO_2 SUPERCRITICO 635
Alejandro Amborgi, M. Mattea, R. Eggers.

VARIACION DE LAS CONCENTRACIONES PUNTUALES Y PROMEDIO DE ACIDO LACTICO Y NaCl DURANTE EL PROCESO DE SALADO DE QUESO PATEGRAS 641
Patricia E. Gerla, Amelia C. Rubiolo.

INFLUÊNCIA DOS SOLUTOS NA CONSERVAÇÃO DE FATIAS DE MANGA NO PROCESSO COMBINADO DESIDRATAÇÃO OSMÓTICA E CONGELAMENTO 647
Maria Helena Nunes, Maria Helena Miguel, Theo Guenter Kieckbusch.

DIFUSION DE CO_2 EN QUESOS 651
Susana E. Zorrilla, Amelia C. Rubiolo.

ENTALPIA DE POLPA DE ABACAXI E SOLUÇÃO DE SACAROSE 657
S. B. Silva, L. C. Neves F., M. D. Hubinger.

FORCED CONVECTION

ESTUDO EXPERIMENTAL DA VARIÂNCIA DA TEMPERATURA EM TUBOS CIRCULARES COM PROMOTORES DE TURBULÊNCIA INTERNOS 663
Rosa L. D. Blanco, Sergio V. Möller.

NUMERICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF VORTEX GENERATORS ON HEAT TRANSFER AND FLOW LOSSES IN FIN-TUBE CHANNELS 669
Jurandir I. Yanagihara, Rogério Rodrigues Jr.

EXPERIMENTAL STUDY OF HEAT TRANSFER AUGMENTATION OF FIN-TUBE CHANNELS WITH VORTEX GENERATORS USING THE NAPHTALENE SUBLIMATION TECHNIQUE 675
Jurandir I. Yanagihara, Juan José Gonzáles Bayón.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE GRANDES ESCALAS DA CONVECÇÃO MISTA SOBRE UM CILINDRO HORIZONTAL AQUECIDO EM ROTAÇÃO 681
Rigoberto E. M. Morales, Aristeu da Silveira Neto.

AN EXPERIMENTAL COMPARISON OF LIQUID JET ARRAY AND SPRAY IMPINGEMENT COOLING IN THE NON-BOILING REGIME 687
K. Oliphant, B. W. Webb, M. Q. McQuay.

A NEW NUSSELT NUMBER CORRELATION FOR TURBULENT FORCED CONVECTION IN PIPES EXPOSED TO CONVECTIVE ENVIRONMENTS 693
Carlos Barroeta, Rafael Reyes, Ulises Lacoa, Antonio Campo

INCREMENTO LOCALIZADO DEL INTERCAMBIO TÉRMICO EN FLUJO LAMINAR ENTRE PLACAS . 699
Manuel Sanchez, Daniel Rebollo, F. Alba Juez, C. Guevara, R. Fidalgo, A. Campo.

TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO ESCOAMENTO TURBULENTO EM DESENVOLVIMENTO ENTRE PLACAS PLANAS PARALELAS 705
Marcio Bueno Dos Santos, Sergio Mourão Saboya, Edson L. Zaparoli.

EL METODO DE LAS COLUMNAS APLICADO A LA TRANSFERENCIA DE CALOR POR CONVECCION FORZADA LAMINAR EN TUBERIAS CIRCULARES 711
Edgar Garcia, Jose Reboredo, Andres Tremante, Ciro Perez.

UNSTEADY FORCED CONVECTION IN THE THERMAL ENTRANCE REGION 717
S. Cheroto, C. A. C. Santos, S. Kakaç.

GENERALIZED INTEGRAL TRANSFORM SOLUTION TO THE LAMINAR THERMAL BOUNDARY-LAYER PROBLEM FOR FLOW PAST A CYLINDER 723
M. A. H. Bolivar, P. L. C. Lage, R. M. Cotta.

ANÁLISE COMPARATIVA DE MODELOS PARA O NÚMERO DE PRANDTL TURBULENTO EM CONVECÇÃO FORÇADA INTERNA 729
Luiz C. Gomes Pimentel, Elcio Nogueira, Renato M. Cotta, Sadik Kakaç.

HEAT AND MASS TRANSFER

TRANSFERÊNCIA DE CALOR E MASSA NO RESFRIAMENTO DE UMA SUPERFÍCIE VERTICAL ATRAVÉS DA EVAPORAÇÃO DE UM FILME LÍQUIDO ESCOANDO EM PARALELO COM AR 735
Maria Regina da Silva Galetti, Pedro Carajilescov.

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL INVESTIGATION ON THE PERFORMANCE OF A COOLING TOWER 741
Marcos S. P. Gomes, Luis F. A. Azevedo, Francisco E. M. Saboya.

DESEMPENHO EXPERIMENTAL DE UM DESTILADOR DE ÁGUA ATMOSFÉRICO DO TIPO REGENERATIVO 747
Naum Fraidenraich, Elielza M. de S. Barbosa.

ENERGY BALANCES AND PHASE EQUILIBRIA IN BRINE CRYSTALLIZATION 753
Maria Eliza Taboada, Teófilo A. Graber, Leonel A. Zapata.

ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA RETENÇÃO GASOSA, DA DIFUSIVIDADE MÁSSICA E DO EQUILÍBRIO INTERFACIAL NA MODELAGEM DE PROCESSOS DE EVAPORAÇÃO POR CONTATO DIRETO 757
E. M. Queiroz, C. M. Hackenberg.

CINÉTICA DE CRISTALIZACIÓN Y COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA CRISTALIZACIÓN DE CLORURO DE POTASIO 763
Teófilo A. Graber, Maria Elisa Taboada, Luís C. Nuñez.

HEAT AND MASS TRANSFER IN POROUS MEDIUM

INFLUÊNCIA DA PROFUNDIDADE DE ATERRAMENTO NO PROCESSO DE SECAGEM DE SOLOS QUE ENVOLVEM CABOS DE POTÊNCIA SUBTERRÂNEOS 769
Ligia Damasceno Ferreira Marczack

MONITORAMENTO DE FRENTES DE UMIDIFICAÇÃO EM SOLOS USANDO A TÉCNICA DA REFLECTOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO 775
C. G. Larrosa R., J. A. B. da Cunha Neto, A. T. Prata.

TRANSPORTE DE SOLUTOS EM SOLOS SOB CONDIÇÕES DE SATURAÇÃO TOTAL E PARCIAL EM ÁGUA. APLICAÇÃO AO PENTACLOROFENOL 781
M. G. Novy Quadri.

TRANSFERÊNCIA DE MASSA GÁS-SÓLIDO EM ESTRUTURAS POROSAS COMPLEXAS 787
C. A. M. Abreu, F. R. C. Silva, M. Benachour, A. Knoechelmann.

HEAT CONDUCTION

ANISOTHERMAL ANALYSIS OF SHAPE MEMORY ALLOY BARS SUBMITTED TO THERMOMECHANICAL LOADINGS 791
Pedro Manuel Calas Lopes Pacheco, Marcelo Amorim Savi.

EXPERIMENTAL SETUP FOR MEASUREMENT OF OVERALL THERMAL RESISTANCE OF BOLTED JOINTS 797
Marcia B. H. Mantelli, M. M. Yavanovich.

CÁLCULO NUMÉRICO SIMPLIFICADO DA TEMPERATURA DO NÚCLEO DE CONDUTORES CAA 803
Guilherme E. Filippo Fernandes Filho.

THE CONJUGATE GRADIENT METHOD APPLIED TO INVERSE PROBLEMS IN HEAT CONDUCTION 809
A. J. Silva Neto.

ANALYSIS OF HEAT CONDUCTION FOR FOOD FREEZING BY SPACE-TIME FINITE ELEMENT METHOD 813
Nelson Moraga, Gerardo Díaz, Aldo Aedo.

FLUXO DE CALOR NÃO-ESTACIONÁRIO EM MEIOS MULTI-COMPOSTOS 817
Paulo Otto Beyer.

HEAT EXCHANGER

ESTUDO COMPARATIVO DE PROCEDIMENTOS HEURÍSTICOS PARA A SÍNTESE DE REDES DE TROCADORES DE CALOR 829
S. G. Oliveira, E. S. Mendonça, F. L. P. Pessoa, E. M. Queiroz.

MINIMUM UTILITY USAGE IN HEAT EXCHANGER NETWORK SYNTHESIS USING GENERALIZED GRAPH MODEL 829
V. F. Assunção, Paulo de Barros Correia.

EL USO DE EXCEL EN EL ANÁLISIS TERMOHIDRÁULICO DE UN INTERCAMBIADOR DE CALOR TIPO ESTRELLA 835
José Aguerrevere, Francisco Barea, Ulises Lacoa e Antonio Campo.

EFFECT OF TUBE-TO-TUBE CONDUCTION ON HEAT EXCHANGER PERFORMANCE 841
Ricardo Romero-Méndez, Mihir Sen, K. T. Yang and Rodney L. McClain.

EFECTO DE LA VARIACIÓN DE LAS PROPIEDADES TERMO FÍSICAS DE LOS FLUIDOS SOBRE LOS COEFICIENTES CONVECTIVOS EN INTERCAMBIADORES DE CALOR DE CARCASA Y TUBOS 847
F. García, J. Segura.

ANALISIS Y SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO TERMICO DE UN INTERCAMBIADOR DE DOBLE TUBO UTILIZADO COMO RECUPERADOR EN UN SISTEMA DE ABSORCION 853
José Fernández-Seara, Jesús Iglesias y Manuel Vázquez.

HEAT TRANSFER ENHANCEMENT IN PLATE FIN-TUBE HEAT EXCHANGER BY LONGITUDINAL VORTEX GENERATORS 859
Jurandir I. Yanagihara, Hamilton Jorge Sabanai.

FLUTUAÇÕES DE PRESSÃO NAS PAREDES DE UM BANCO DE TUBOS COM ESCOAMENTO TURBULENTO 865
Luiz Augusto M. Endres, Sergio V. Möller.

ANÁLISE "PINCH" E AVALIAÇÃO SISTEMATICA APLICADAS À SÍNTESE DE REDES FLEXÍVEIS DE TROCADORES DE CALOR 871
Marcone Lopes da Silva, Alberto Luiz de Andrade

FRICTION FACTOR IN ANNULAR CONDUITS WITH TUBULAR FINS 877
J. R. Sodré, J. A. R. Parise.

HEAT PIPE, THERMOSIPHON AND CAPILLARY PUMPS

EXPERIMENTAL EXAMINATION OF A PROTOTYPE OF THE CAPILLARY PUMPED LOOP WITH POROUS CONDENSER 883
Valeri V. Vlassov, Issamu Muraoka.

COMPORTAMENTO TERMICO DE BOMBAS CAPILARES DE RANHURAS CIRCUNFERENCIAIS 889
E. Bazzo, J. C. Passos, S. Colle.

EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF VARIABLE CONDUCTANCE HEAT PIPE WITH EXTERNAL HOT UNWICKED RESERVOIR 895
Valeri V. Vlassov, Luis Carlos Cordeiro Jr.

USO DE CONVECÇÃO INDUZIDA POR TENSÃO SUPERFICIAL NO BOMBEAMENTO DE VAPORES EM SISTEMAS DE VÁCUO 901
Luís Antônio Waack Bambace.

HEAT TRANSFER AND FLUID FLOW IN POROUS MEDIUM

MOMENTUM AND ENERGY TRANSFER IN AN INCOMPRESSIBLE FLUID FLOW THROUGH A NONSATURATED POROUS MEDIUM 907
Maria Laura Martins-Costa, Rogério M. Saldanha da Gama.

CARACTERIZAÇÃO HIDRODINÂMICA DE MEIOS POROSOS ENVOLVENDO A UTILIZAÇÃO DE UM PROGRAMA SIMULADOR DE UM TENSIÔMETRO 913
M. B. Quadri.

DISCRETE MULTIPHASE EQUILIBRIUM SIMULATION IN POROUS MEDIA 917
R. A. Pieritz, J. P. Laurent.

THERMO-HYDRAULIC CHARACTERIZATION OF COLD PLATES USING MECHANICALLY COMPRESSED PERMEABLE LAYERS 923
J. L. Lage, B. V. Antohe.

HEAT TRANSFER WITH PHASE CHANGE - BOILING

ANALYSIS OF SUBCOOLED FLOW BOILING IN TUBES 929
Élcio Nogueira, Jan-Mark Kunberger, Claudia O. Gavrilescu, Sadik Kakaç.

EBULIÇÃO EM PELÍCULA EM PAREDE CILÍNDRICA VERTICAL 935
José Antônio R. de Souza, Cirus M. Hackenberg.

TWO-PHASE FLOW INSTABILITIES IN BOILING SYSTEMS 941
Sadik Kakaç, Claudia O. Gavrilescu, Elcio Nogueira.

EFFECT OF MODELING ASSUMPTIONS ON THE DYNAMICS AND STABILITY OF HEATED BOILING CHANNELS 947
Mauricio A. Pinheiro Rosa, Michael Z. Podowski.

HEAT TRANSFER WITH PHASE CHANGE - MELTING AND SOLIDIFICATION

MODELING KINETIC UNDERCOOLING THROUGH PHASE-FIELD EQUATIONS WITH NON-LINEAR DYNAMICS 953
A. L. Fazenda, J. S. Travelho, Maurício Fabbri.

SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA PROBLEMAS DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR COM MUDANÇA DE FASE EM GEOMETRIA AXI-SIMÉTRICA 957
A. J. Diniz, C. R. M. Maia, E. L. Zaparoli.

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE MUDANÇA DE FASE USANDO FORMULAÇÃO EM UM DOMÍNIO COM ACOMPANHAMENTO DA FRENTE 963
Renata Santos Crespo, Clovis R. Maliska.

ANÁLISE TRIDIMENSIONAL DA SOLIDIFICAÇÃO DE LIGAS ATRAVÉS DE UMA ABORDAGEM NUMÉRICA BASEADA NA ANALOGIA ENTRE SISTEMAS TÉRMICOS E CIRCUITOS ELÉTRICOS 969
Carlos Alexandre dos Santos, Noé Cheung, Jaime A. Spim Junior, Amauri Garcia.

SIMULATION OF THE TRANSIENT THERMAL BEHAVIOR OF A FINITE SLAB IN A STEFAN PROBLEM, BY THE NETWORK METHOD 975
F. Alhama, J. F. López Sánchez, M. Alarcón, C. F. Gonzáles-Fernández.

MELTING-SOLIDIFICATION IN PHASE CHANGE MATERIAL PACKAGE WITH NONUNIFORM FILLER 979
Valeri V. Vlassov.

ESTUDO DA RECUPERAÇÃO DO CALOR ARMAZENADO EM MATERIAIS DE MUDANÇA DE FASE NO INTERIOR DE DUTOS CILÍNDRICOS 985
C. S. Stampa, S. L. Braga.

FUSÃO EM CAVIDADES NA PRESENÇA DE CONVECÇÃO NATURAL 991
Gisele M. R. Vieira, S. L. Braga, Dominique Gobin.

BALANCES DE ENERGÍA EN CRISTALIZADORES POR ENFRIAMIENTO 997
Horacio A. Correa, Cynthia L. Carvajal.

SIMULAÇÃO DA RECUPERAÇÃO DA ENERGIA ARMAZENADA EM UM TERMOACUMULADOR COM MUDANÇA DE FASE 1001
Carlos Eduardo Leme Nóbrega, Sérgio L. Braga.

OPTMIZACION DE LA CALIDAD DE LAS PIEZAS OBTENIDAS EN MOLDES CERAMICOS POROSOS MEDIANTE EL CONTROL DEL ENFRIAMIENTO DURANTE LA SOLIDIFICACION 1007
Pablo Varela, Osvaldo Oviedo, Nelson Cotella, Omar Radevich, Rodolfo Khol.

INTERNAL COMBUSTION ENGINES

MÉTODOS EXPERIMENTAIS PARA IDENTIFICAÇÃO DE DETONAÇÃO EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA 1011
Alessandro B. de S. Oliveira, Luiz Carlos Dantas Arboés, João Nildo de Souza Vianna, Fernando J. R. Neves.

DESEMPENHO DE UM MOTOR ALIMENTADO A ÁLCOOL ALTAMENTE HIDRATADO 1017
Eduardo Klein, Pedro Mello.

SPARK PLUG POSITION EFFECTS ON COMBUSTION, EMISSIONS AND PERFORMANCE OF AN ENGINE ACCORDING TO A FLAME GEOMETRY MODEL 1023
José Ricardo Sodré, D. A. Yates.

ESTUDIOS PARAMETRICOS DE LOS CICLOS DE LOS MOTORES DE ENCENDIDO POR CHISPA 1029
Maria J. Martín V., Simón J. Fygueroa S., Domingo Hernández H.

TRANSIENT HEAT TRANSFER ANALYSIS OF A DIESEL ENGINE PISTON 1033
M. J. Colaço, Helcio R. B. Orlande.

A SIMPLIFIED MODEL FOR IGNITION PROCESS IN A DIESEL COMBUSTION ENGINE 1039
Fernado Fachini Filho, Amable M. Liñán.

MODELADO Y SIMULACION DE MOTORES DE ENCENDIDO POR CHISPA DE CUATRO TIEMPOS .. 1045
Jesus Fernando Morea Roy, Mariano Muñoz, Francisco Moreno, Alfredo Gonzalez.

MODELAGEM DOS COLETORES DE ADMISSÃO E DESCARGA PELO MÉTODO DA AÇÃO DAS ONDAS E SUA INFLUÊNCIA SOBRE A PRECISÃO DOS RESULTADOS DO PROGRAMA SIMULADOR DE MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA 1051
João Nildo de Souza Vianna, Guilherme Lara Oliveira, Lúcio Hellery Holanda Oliveira.

COMBUSTION PERFORMANCE OF SOOT (PARTICULATE MATTER) IN CERAMIC FILTER TRAPS .. 1057
Alejandro F. Romero, Rogelio Gutiérrez, Rodrigo García Moreno.

INSTRUMENTATION AND EXPERIMENTAL TECHNIQUES

PODER TERMOELÉTRICO EM CIRCUITOS A ELETRODOS DEPOSITADOS 1063
Saulo Güths, Rogério Vilain.

HEAT FLUX MEASUREMENT APPLIED TO THE STUDY OF THERMAL HEAT TRANSFERS IN A COMPOSITE SOLAR WALL 1067
L. Zalewski, S. Lassue, B. Duthoit.

EXPERIMENTAL INVESTIGATIONS IN ROUND BUBBLE PLUMES 1073
Jader R. Barbosa Jr., L. J. S. Bradbury.

LOCAL MEASUREMENT OF THE VOID FRACTION DISTRIBUTION IN TWO-PHASE FLOW USING A RESISTIVITY PROBE TECHNIQUE 1079
Luiz Felipe M. de Moura, Christophe Marvillet.

DETECÇÃO DA EBULIÇÃO SUBRESFRIADA ATRAVÉS DA ANÁLISE ESPECTRAL DOS SINAIS DE TRANSDUTORES DE PRESSÃO 1085
Alfredo José Alvim de Castro, Dieter Stegemann.

UTILIZAÇÃO DE TERMOPARES PARA MEDIÇÃO DE VELOCIDADE E TEMPERATURA EM ESCOAMENTOS TURBULENTOS 1091
Aurimar M. Reis, Jurandir I. Yanagihara, Jeronimo S. Travelho.

CONSTRUCTION AND CALIBRATION OF A SYSTEM FOR MEASURING LOW AIR FLOW VELOCITIES IN NATURAL CONVECTION HEAT TRASNFER PROCESSES 1097
Alan C. B. da Rocha, George S. Marinho, Leônidas Hildebrandt Jr., Samuel W. Celere.

VISUALIZAÇÃO EXPERIMENTAL DO ESCOAMENTO AO REDOR DE CILINDROS DE BASE QUADRADA POSICIONADOS TRANSVERSALMENTE AO FLUXO LIVRE 1103
Sérgio Said Mansur, Edson Del Rio Vieira, Massami Saito, George A. S. Esperança.

CONSTRUÇÃO E CALIBRAÇÃO DE DOIS MODELOS DE TUBO DE PITOT DE 5 FUROS PARA APLICAÇÃO EM CÂMARAS DE COMBUSTÃO 1109
Waldir A. Bizzo, A. L. Cardoso, Leonardo Goldstein Jr.

ESTUDO TEÓRICO DA MEDIÇÃO DE GRANDES VAZÕES BASEADA EM TRANSIENTES HIDRÁULICOS 1115
Idalberto Ferreira de Ataídes, Aristeu da Silveira Neto, Carlos Roberto Ribeiro.

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL ANALYSIS FOR THE RETARDING TORQUES OF A TURBINE FLOW METER 1121
Vilson C. S. Ferreira, C. F. Favaretto.

LIQUID FILM MOTION UNDER THE ACTION OF GRAVITATIONAL AND CENTRIFUGAL FIELDS 1127
Eugênio Spanó Rosa, Marcelo L. Morandin, Silvio G. Dias, Fernando A. França.

KINETIC, CATALYSIS AND REACTORS

A UTILIZAÇÃO DA PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA, ASSOCIADA À METODOLOGIA "PINCH" DE RECUPERAÇÃO DE ENERGIA EM REDES, NA BUSCA DA MELHOR CONFIGURAÇÃO ENERGÉTICA, NA ETAPA DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO, NA REFINARIA DE PETRÓLEO DE PAULÍNEA (REPLAN) 1133
Luciano Fernando dos Santos Rossi, Antonio Carlos Bannwart.

MODELADO DE REACTORES TANQUE AGITADO PARA LA BIODEGRADACION ANAEROBIA DE RESIDUOS ORGANICOS SOLIDOS 1139
Enrique D. Negri.

METHANE PHOTO-POLYCHLORINATION IN THE NON-ISOTHERMAL TUBULAR REACTOR IN LAMINAR FLOW REGIME.I. APPLICABILITY OF STEADY-STATE APPROXIMATION vs. SCALE-UP 1143
Ricardo J. Grau, María I. Cabrera, Alberto E. Cassano.

METHANE PHOTO-POLYCHLORINATION IN THE NON-ISOTHERMAL TUBULAR REACTOR IN LAMINAR FLOW REGIME.II. WALL REACTIONS INFLUENCE vs. SCALE-UP 1149
María I. Cabrera, Ricardo J. Grau, Alberto E. Cassano.

TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO - PARTE I: CARACTERIZACION, ECUACIONES.FUNDAMENTALES DE MODELADO Y CLASIFICACIÓN 1155
Oscar D. Quiroga, Jorge R. Avanza, Angel J. Fusco, Luis T. Villa.

TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO - PARTE II: MODELADO CINETICO DE TRASFORMACIONES I E II 1161
Oscar D. Quiroga, Jorge R. Avanza, Angel J. Fusco, Luis T. Villa.

TRANSFORMACIONES FLUIDO-SOLIDO REACTIVO - PARTE III: MODELADO CINETICO DE TRASFORMACIONES III E IV 1167
Oscar D. Quiroga, Jorge R. Avanza, Angel J. Fusco, Luis T. Villa.

LUBRICATION

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS VISCOSOS A BAIXAS VELOCIDADES UTILIZANDO UM MÉTODO NUMÉRICO IMPLÍCITO 1173
Marcello A. S. Ferrari, João L. F. Azevedo.

NON STATIONARY FLOW BETWEEN TWO PARALLEL PLATES WITH THE GAP PARTIALLY FILLED WITH A POROUS MEDIA 1179
Ana Maria Aquino, Luiz R. Carrocci, Leon Sinay.

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE REYNOLDS PARA MANCAIS AXIAIS DE SAPATAS SETORIAIS 1185
Georgette Emile El Mouallem, Nelson Manzanares Filho, Vilmar Arthur Schwarz.

MASS TRANSFER

DISPERSION Y RETROMEZCLADO EN UNA COLUMNA DE EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO YORK-SCHEIBEL 1191
Maria G. Gómez, A. Ballesteros, J. M. Segnini, M. Zamora, F. Pironti.

EXTRAÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO EM COLUNAS COM PRATOS PULSANTES 1195
Luiz Mário Nelson de Góis, Elias B. Tambourgi, João A. F. R. Pereira.

CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DO EFEITO DO DISTRIBUIDOR DO GÁS SOBRE A TRANSFERÊNCIA DE MASSA GÁS/LÍQUIDO EM COLUNA DE BORBULHAMENTO ASCENDENTE 1201
D. S. H. Malta, A. Knoechelmann, C. A. M. de Abreu, M. Benachour.

TRANSFERENCIA DE MASA SOLIDO-LIQUIDO EN TANQUES AGITADOS 1205
Graciela Montiel, Jorge Avanza, Oscar Quiroga.

ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE MURPHREE NUMA COLUNA AGITADA POR PALHETAS ROTATIVAS 1211
A. P. B. Rabelo, R. R. Souza, E. B. Tambourgi, J. A. F. R. Pereira.

ISOTHERMS OF MAIZE AND SOYBEANS: STUDY OF THE GAB EQUATION AT DIFFERENT TEMPERATURES 1217
M. C. Gely, S. A. Giner.

EVALUACION DE LA ALTURA EQUIVALENTE POR PLATO TEORICO A UN EMPAQUE ESTRUCTURADO NACIONAL 1223
Rosa Hilda Chávez, Arquimides O. Suástegui.

MÓDELO DE ORDEM REDUZIDA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO EXTRATIVA SALINA ESTUDO DA INFLUÊNCIA DA ESCOLHA DO SAL 1229
Paulo R. Alves dos Reis, Sergio Persio Ravagnani.

DIFUSION DE AGUA LIGADA EN BIOPOLIMEROS 1235
Marcela P. Tolaba, Constantino Suarez, Roberto J. Aguerre.

ABSORÇÃO NÃO-ISOTERMICA COM REAÇÃO QUIMICA 1239
Andrea Selene E. X. Stragevitch, Alberto L. de Andrade.

ABSORPTION OF AMMONIA FROM A GASEOUS MIXTURE WITH HYDROGEN IN A WETTED WALL ABSORBER IN LAMINAR NATURAL CONVECTION 1245
Gilberto Martins, José Tomaz Vieira Pereira.

A SERIES SOLUTION FOR THE FILM MODEL OF MULTICOMPONENT DIFFUSION 1251
Claudio Olivera-Fuentes.

SIMULAÇÃO DA TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM UMA COLUNA DE ABSORÇÃO CO_2-ÁGUA, UTILIZANDO O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS 1257
Adriano da Silva, Antônio Augusto Ulson de Souza, Selene M. A. Gueli Ulson de Souza, José Alexandre Borges Valle.

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DO COEFICIENTE DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM ESCOAMENTOS BIFÁSICOS COM GÁS OZÔNIO E ÁGUA EM REATORES TUBULARES 1263
A. Filipe Montalvão, Carlos Russo.

ABSORÇÃO DE OXIGÊNIO E DESSORÇÃO DE GASES ORGÂNICOS PELA ÁGUA 1267
Alessandra Morales Momesso, Alan Cavalcanti da Cunha, Selva Amaral Garcia Schulz, Harry Edmar Schulz.

VOLUME III

MEMBRANE SEPARATION PROCESS

CHARACTERIZATION OF POROUS CERAMIC MEMBRANES FOR MICROFILTRATION 1273
Cristina Almandoz, Miguel Amaral, Rosa Antón, Jose Marchese.

MODELO DIFUSIONAL DE EXTRACCION DE COBRE POR SOLVENTES SOBRE MEMBRANAS LIQUIDAS DE SOPORTE SOLIDO APLICADO A SOLUCIONES RESIDUALES DE LIXIVIACION DE MOLIBDENITA 1277
Fernando Valenzuela, Claudia Paratori, Cristián Tapia, Carlos Basualto, Jaime Sapag.

FACILITATED TRANSPORT OF PROPYLENE IN SUPPORTED LIQUID MEMBRANES 1281
A. Acosta, J. Cesco, J. Marchese.

TRANSPORTE Y SEPARACION DE NIOBIO(V) Y TANTALIO(V) CON MEMBRANAS LIQUIDAS SOPORTADAS 1287
M. Campderrós, A. Acosta, J. Marchese.

SUPPORTS EFFECT ON COPPER TRANSFER THROUGH A LIQUID MEMBRANE 1291
M. Campderrós, A. Acosta, J. Marchese.

TRANSFER AND RETENTION COEFFICIENTS IN ULTRAFILTRATION ASYMMETRIC MEMBRANES 1295
C. Pagliero, N. Ochoa, J. Marchese.

EFECTO DEL SOPORTE Y ESPESOR DE MOLDEADO SOBRE LOS PARAMETROS DE TRANSPORTE EN MEMBRANAS DE ULTRAFILTRACION 1299
N. Ochoa, C. Pagliero, J. Marchese.

MULTIPHASE SYSTEMS

TRANSFERÊNCIA DE CALOR NO ESCOAMENTO ANULAR DESENVOLVIDO DE DOIS LÍQUIDOS IMISCÍVEIS EM TUBOS CURVOS 1303
Ricardo Junqueira Silva, Márcio Ziviani, Ramón M. Valle.

MEZCLADO DEL LIQUIDO EN UNA COLUMNA DE BURBUJEO DE TUBOS CONCENTRICOS EN OPERACION TRIFASICA 1309
E. Ventura-Medina, A. E. Sáez, F. F. Pironti.

ESTABILIDADE DO ESCOAMENTO BIFÁSICO ANULAR 1315
Eduardo F. Gaspari, Sérgio N. Bordalo.

UMA SOLUÇÃO ASSINTÓTICA PARA O ESTUDO DA TRANSIÇÃO DE UM ESCOAMENTO GÁS-LÍQUIDO A CONTRA-CORRENTE PARA CO-CORRENTE 1321
Milton Biage, Idalberto Ferreira de Ataídes.

AIR-WATER AND AIR-XANTHAN GUM VOID FRACTION IN UPWARD CO-CURRENT SLUG FLOW THROUGH INCLINED ANNULI 1327
Paulo Hora de Andrade Jr., Edson Yoshihito Nakagawa, Antonio Carlos Bannwart.

NATURAL CONVECTION

CONJUGATE NATURAL CONVECTION HEAT TRANSFER PROCESS BETWEEN TWO FLUIDS SEPARATED BY AN HORIZONTAL WALL 1333
E. Luna, C. Treviño, F. Méndez.

CONVECÇÃO NATURAL EM UMA CAVIDADE RETANGULAR RESFRIADA NA PAREDE SUPERIOR . 1339
D. J. Bispo, A. O. Nieckele, S. L. Braga.

NATURAL CONVECTION BETWEEN CONCENTRIC ELLIPSES: ANALYSIS OF THE LIMITING CASES 1345
A. R. Cunha, M. A. Livramento, J. F. Vasconcellos, C. R. Maliska.

PARTICULATE SYSTEMS

SHEAR-INDUCED GRADIENT DIFFUSIVITY OF A MONODISPERSE DILUTE SUSPENSION 1351
Francisco R. da Cunha, Edward J. Hinch.

SEDIMENTAÇÃO NA REGIÃO DE TRANSIÇÃO NA ENTRADA DE TUBOS DE SEÇÃO QUADRADA E RETANGULAR 1357
Carlos Alberto Soares, Harry E. Schulz, W. N. L. Roma, L. Di Bernardo.

A NUMERICAL METHOD FOR THE SIMULATION OF SEDIMENTING PARTICLES WITH IMPENETRABLE BOUNDARIES 1363
Francisco R. da Cunha.

THE TURBULENCE OF MIXING OF IRON PARTICLES IN WATER SYSTEMS 1369
Guilherme G. Camozzato, Roberto de Souza, Alexandre J. da Silva, Átila P. Silva Freire.

HYDRODYNAMIC SELF-DISPERSION OF SEDIMENTING NON-BROWNIAN SPHERES 1375
Francisco R. da Cunha, Edward J. Hinch.

EFEITOS DE PAREDE E POPULAÇÃO NA VELOCIDADE DE QUEDA DE PARTÍCULAS IRREGULARES EM FLUIDOS NÃO-NEWTONIANOS 1381
Carlos H. M. de Sá, André L. Martins, Affonso M. F. Lourenço, Wilson B. Aguiar Jr.

VARIAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DA HEMATITA DOS EXTRATOS NA FLUIDIZAÇÃO INTERMITENTE E CONTÍNUA DE MISTURAS DE HEMATITA E QUARTZO 1387
A. A. Brazil, R. de Souza, O. D. Cuéllar.

NONLINEAR FLOW IN INDUSTRIAL CYCLONES 1393
Roberto A. Clemente, Adolfo L. Godoy, Silvia A. Nebra.

IMPROVEMENT OF A SUGARCANE SEPARATOR EFFICIENCY UNSING NUMERICAL AND EXPERIMENTAL TECHNIQUES 1399
R. M. Girardi, Nide G. C. R. Fico Jr., J. L. F. Azevedo.

MATHEMATICAL MODEL FOR THE TRANSPORT OF SOLIDS IN HORIZONTAL PIPES BY POLYMER SOLUTIONS 1405
N. E. Ramírez, J. B. Bello, A. E. Sáez.

SPATIAL DISTRIBUTION OF GAS AND SOLID PHASES IN CONICAL SLURRY BUBBLE COLUMNS . 1411
S. Siquier, A. Ronchetti, M. Calderón, P. Llaguno, A. E. Sáez.

PETROLEUM ENGINEERING

SLUG MEASUREMENTS IN A GAS-OIL PIPELINE 1417
Marcelo de A. Lima Gonçalves, Claudio B. Costa e Silva, Marcos H. J. Pedras.

STUDY OF PIG MOTION IN PIPELINES 1423
L. F. A. Azevedo, A. M. B. Braga, M. G. F. M. Gomes.

DEVELOPMENT OF SEMI-EMPIRICAL MODELS TO PREDICT THE CRITICAL CONDITIONS OF DRILLED CUTTINGS TRANSPORT IN DEVIATED WELLS 1429
Moacyr B. Laruccia, Erghu Gao, John T. Ford, Babs Oyeneyin, James M. Peden.

REDUÇÃO DE ARRASTE EM ESCOAMENTOS DE FLUIDOS DE PERFURAÇÃO 1435
João C. de Queiroz Neto, André L. Martins, Carlos H. M. de Sá, Sandra C. S. Rocha.

SIMULAÇÃO DO COMPORTAMENTO TÉRMICO DE PETRÓLEO EM LINHAS SUBMARINAS SENDO AQUECIDO POR ABSORÇÃO DE RÁDIO-FREQUÊNCIA 1441
C. V. M. Braga, Sérgio L. Braga, D. Kircher, E. J. Coelho.

AVALIAÇÃO COMPARATIVA DE DIFERENTES TÉCNICAS ANALÍTICAS PARA A DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA INICIAL DE APARECIMENTO DE CRISTAIS NO PETRÓLEO 1447
Luiz Carlos Carmo Marques, André L. C. Machado, L.C. Vieira, João Rodrigues Filho.

ANÁLISE DO PROCESSO DE AQUECIMENTO ELETROMAGNÉTICO DE RESERVATÓRIOS PORTADORES DE ÓLEO DE ALTA VISCOSIDADE 1453
Sylvia T. Cambra, Cirus M. Hackenberg, P. L. Lage, Carlos M. Portela.

EFEITOS DA CORRENTE ALTERNADA NA PERMEABILIDADE RELATIVA 1459
R. Z. Moreno, E. J. Bonet, Osvair V. Trevisan.

DESIGNING FLUID VELOCITY PROFILES FOR OPTIMAL PRIMARY CEMENTING 1465
Maria das Graças Pena Silva, André Leibson Martins

POROUS MEDIA FLOW MODELING FOR PETROLEUM RESERVOIR SIMULATION 1471
Marcos H. J. Pedras, Marcelo J. S. de Lemos.

SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE RESERVATÓRIO DE PETRÓLEO: COMPARAÇÃO ENTRE AS METODOLOGIAS, TI, IMPES E AIM 1477
Francisco Marcondes, Clovis Raimundo Maliska, Mário Cesar Zambaldi.

ANÁLISE DO ERRO DAS APROXIMAÇÕES UTILIZADAS NA MODELAGEM DE ESCOAMENTOS DE ANULARES EXCÊNTRICOS 1483
Mário B. Villas-Boas, André L. Martins

PROPULSION

EXPERIMENTAL STUDY OF NOZZLES EROSION DUE TO THE ACTION OF COMBUSTION GASES 1489
José Gobbo Ferreira.

EXPERIMENTAL PROGRESSES IN THE RESEARCH OF SOLID FUEL RAMJET PROPULSION 1495
José Gobbo Ferreira.

MODELAGEM E PESQUISA DOS ESCOAMENTOS REAGENTES EM TUBEIRAS 1499
A. P. Spilimbergo, R. L. Iskhakova

LIMITES DE OPERAÇÃO DE UMA TURBINA A GAS 1505
Luis Henrique Getino, João Roberto Barbosa.

GASDYNAMIC FLOW OVER A FLAME DEFLECTOR 1511
Paulo Moraes Jr., Algacyr Morgenstern Jr

THERMAL DESIGN AND RESULTS ANALYSIS OF THE THERMAL BALANCE TEST OF THE CBERS BATTERY COMPARTMENT 1517
Rosângela M. G. Leite, Issamu Muraoka.

REFRIGERATION AND AIR CONDITIONING

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE REFRIGERADORES DOMÉSTICOS: INFLUÊNCIA DA TEMPERATURA AMBIENTE EM SEU DESEMPENHO 1523
Carlos Almir Monteiro de Holanda.

ESTUDO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DO DESEMPENHO DE TUBOS CAPILARES ADIABÁTICOS E NÃO ADIABÁTICOS COM CFC 12 E HFC 134a 1527
Marco A. S. de Paiva, Flávio A. S. Fiorelli, Roberto A. Peixoto, Alberto Hernandez Neto, Otávio M. Silvares, Paulo Yodianitskaia.

ESTUDOS SOBRE O DESEMPENHO DE SISTEMAS DE REFRIGERAÇÃO DE PEQUENO PORTE 1533
Flávio A. S. Fiorelli, Otávio M. Silvares.

INFLUENCE OF THE REFRIGERANT PROPERTIES ON THE REFRIGERATION SYSTEM PERFORMANCES 1539
Claudio Saavedra O., Eric Winandy.

PERFORMANCE ANALYSIS OF AIR-COOLED CONDENSING UNITS RUNNING ON CFC SUBSTITUTES 1545
S. Y. Motta, L. G. Chaves, J. A. R. Parise.

PERFORMANCE DE UM SISTEMA FRIGORÍFICO COM BANCO DE GELO PARA CONDICIONAMENTO DE AR 1551
Dênio L. Panissi, Eli Silva, Manuel S. V. de Almeida.

TERMOACUMULAÇÃO: SIMULAÇÃO E EXPERIMENTAÇÃO 1557
Osvaldo J. Venturini, Manuel S. V. de Almeida, Eli Silva.

RHEOLOGY

PHYSICO-CHEMICAL ASPECTS OF THE ADHESION OF CRUDE OIL TO WET MORTARS 1563
Geraldo S. Ribeiro, Michael S. Arney, Timothy J. Hall, Daniel D. Joseph.

LIQUID HOLDUP MEASUREMENTS IN SLUG FLOW OF AIR/NON-NEWTONIAN LIQUID AND AIR/WATER THROUGH INCLINED PIPE 1569
João Tadeu Vidal de Sousa, Edson Yoshihito Nakagawa, Fernando de Almeida França.

HEAT TRANSFER TO HERSCHEL-BULKLEY FLUIDS IN LAMINAR FLOW THROUGH SHORT TUBES 1575
Márcia Soares, Paulo R. Souza Mendes, Mônica F. Naccache.

EXPERIMENTS, COMPUTATION AND THEORY FOR FLOWS OF BINGHAM LIQUIDS THROUGH IDEAL POROUS MEDIA 1581
Paulo R. Souza Mendes, Mônica F. Naccache, A. O. Nieckele, C. V. M. Braga, L.F.A. Azevedo, R.L.A. Santos.

INVERSE PROBLEM FOR ESTIMATING THE HEAT FLUX TO A NON-NEWTONIAN FLUID IN A PARALLEL PLATE CHANNEL 1587
H. A. Machado, Heleio R. B. Orlande.

ON A THERMODYNAMICALLY CONSISTENT MODELING OF NON-NEWTONIAN FLUID BEHAVIOR 1593
Heraldo. S. Costa Mattos.

PREDICTION OF TURBULENT FLOW OF NON-NEWTONIAN FLUIDS IN PIPES AND ANNULI 1599
Marco A. Teixeira, A. David Gosman.

SOLAR ENERGY

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DE UM COLETOR SOLAR ACUMULADOR 1605
A. L. de Bortoli, Horacio A. Vielmo, A. Krenzinger.

CONCENTRADORES TIPO - V DE MÚLTIPLOS ESTÁGIOS 1611
Danilo Lazzeri Pena.

EFFICIENCY ANALYSIS OF A BOILING COLLECTOR IN THERMAL SIPHON OPERATION 1615
Maria Eugênia Vieira, Rafaela Frota Reinaldo.

EFICIÊNCIA DE COLETORES SOLARES COM ABSORVEDORES ALETADOS 1621
Sergio Mourão Saboya, Francisco Eduardo Mourão Saboya.

DESHIDRATADOR SOLAR: DISEÑO, CONSTRUCCION Y FUNCIONAMIENTO 1627
José L. Rodríquez, M. E. Guerrero, A. M. Gimenez, M. R. Palma.

ESTUDO SOLARIMÉTRICO COM BASE NA DEFINIÇÃO DE MÊS PADRÃO E SEQUÊNCIA DE RADIAÇÃO DIÁRIA, COM BASE NA BIBLIOTECA DE MATRIZES DE MARKOV 1633
Ana Paula Cardoso Guimarães, Elizabeth Marques Duarte Pereira.

CÁLCULO DE LA ENERGÍA SOLAR QUE INCIDE SOBRE CUALQUIER SUPERFICIE 1639
Juan Manuel Rodríguez Menéndez.

MEDICIÓN Y MODELIZACIÓN DE LA RADIACIÓN SOLAR ULTRAVIOLETA SOBRE ROSARIO, ARGENTINA (PERÍODO 1993-1995) 1645
Rubén D. Piacentini, Orlando M. Alfano, Enrique D. Albizzati.

ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE UNA LAGUNA SOLAR.OPTIMIZACIÓN DEL CALOR RETIRADO 1649
Ernesto Francisco G., Juan Manuel Rodríguez Menéndez.

THERMAL RADIATION

APPLICATION OF THE ZONING METHOD IN RADIATIVE INVERSE PROBLEMS 1655
F. H. R. França, L. Goldstein Jr.

MÉTODO DAS ORDENADAS DISCRETAS ASSOCIADO À INTEGRAÇÃO FORMAL DA EQUAÇÃO DE TRANSFERÊNCIA DE RADIAÇÃO EM AXISSIMETRIA CILÍNDRICA 1661
Zaqueu E. da Silva, Domenique Doermann, Michel Laurent.

COMPARAÇÃO ENTRE DOIS MÉTODOS DE ORDENADAS DISCRETAS APLICADAS A FORMA INTEGRAL DA EQUAÇÃO DE TRANSFERÊNCIA RADIATIVA 1667
Luís M. Moura, Zaqueu E. da Silva, Jean-François Sacadura, Michel Laurent.

RADIACION EN UN SISTEMA HETEROGENEO COMPUESTO DE PARTICULAS SEMITRANSPARENTES. ABSORCION, DISPERSION Y FUNCION DE FASE EN EL LIMITE INDEPENDIENTE 1673
Enrique D. Negri.

ESTUDO DA TRANSFERÊNCIA RADIATIVA EM GASES NÃO-CINZENTOS UTILIZANDO O MÉTODO DAS ORDENADAS DISCRETAS ASSOCIADA AO MODELO ESTATÍSTICO A BANDAS ESTREITAS 1677
A. B. de Miranda, J.-F. Sacadura, A. Delmas.

CALORIMETRIC DETERMINATION OF THE LONGWAVE EMISSIVITY OF PAINTS 1683
Vicente de Paulo Nicolau, Saulo Güths, Luiz Fernandes Lemos.

MODELO DE TROCA DE CALOR RADIANTE ENTRE DUAS SUPERFÍCIES CILÍNDRICAS CONCÊNTRICAS PELO MÉTODO DE MONTE CARLO 1687
Jorge R. Henriquez, R. J. Rodriguez, Musa Mohamed R., Leonardo Goldstein Jr.

CALCULO DEL FACTOR DE FORMA ENTRE LA PERSONA (CUYA FORMA SE ASIMILA A UNA ESFERA) Y LAS SUPERFICIES QUE LA RODEAN EN UN AMBIENTE INTERIOR 1693
Alfredo Esteves.

DETERMINAÇÃO DE UMA CORRELAÇÃO PARA O CÁLCULO DA RADIAÇÃO SOLAR DIFUSA INCIDENTE A PARTIR DA RADIAÇÃO SOLAR GLOBAL 1699
Ênio Bueno Pereira, Samuel Luna de Abreu, Sérgio Colle.

COLETOR E RADIADOR ESPACIAL 1703
E. C. Garcia, S. M. Saboya, E. L. Zaparoli.

THERMOHYDRAULIC OF NUCLEAR REACTORS

ANÁLISE EXPERIMENTAL DA CIRCULAÇÃO NATURAL DE ÁGUA ATRAVÉS DE UM CIRCUITO FECHADO EM REGIME TRANSITÓRIO 1709
Marcelo de Bastos Lavrador, Carlos Valois Maciel Braga, Pedro Carajilescov.

UMA METODOLOGIA PARA ANÁLISE DO SISTEMA DE REMOÇÃO DE CALOR RESIDUAL DE REATORES RÁPIDOS ATRAVÉS DO VASO DE SEGURANÇA 1713
F. A. Braz Filho, Eduardo M. Borges, M. P. Rosa, F. Rocamora, L. Guimarães.

BOMBA ELETROMAGNÉTICA DE CORRENTE CONTÍNUA COM IMÃS DE TERRAS RARAS PARA CONTROLE DE ESCOAMENTO DE METAIS LÍQUIDOS 1719
Eduardo M. Borges, F. Sircilli Neto, A. Passaro, F. A. Braz Filho.

CIRNAT - A CODE FOR ONE AND TWO-PHASE NATURAL CIRCULATION 1725
José Luís Ferraz Bastos.

ANÁLISE DE CORRELAÇÕES DE FLUXO CRÍTICO DE CALOR PARA REATORES PWR COM BAIXO FLUXO DE MASSA 1731
Pedro Carajilescov.

THERMOPHYSICAL PROPERTIES

INTEGRAL TRANSFORM TECHNIQUE APPLIED TO THE IDENTIFICATION OF SOLID'S THERMAL DIFFUSIVITY 1737
Zaqueu E. da Silva, Martin Raynaud, Michel Laurent.

DETERMINAÇÃO DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA DO URUCUM 1741
Lucianna Gama Vieira, Odélsia S. de Alsina.

UM NOVO MÉTODO PARA ESTIMAÇÃO SIMULTÂNEA DE PROPRIEDADES TÉRMICAS IN SITU ... 1747
S. M. M. Lima e Silva, Gilmar Guimarães.

IMPLEMENTAÇÃO E PROJETO DE UM APARELHO DE DICKERSON PARA DETERMINAÇÃO DE DIFUSIVIDADE TÉRMICA EM PRODUTOS HETEROGÊNEOS 1753
Claudio L. C. Frankenberg, Simone Bastos.

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF WATER AND THEIR MAIN FIRST PARTIAL DERIVATIVES ... 1757
Marcelo A. Veloso.

OOP APPROACH FOR CALCULATING THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF HIGH-TEMPERATURE GAS MIXTURE S 1763
Jorge Koreeda, José Nivaldo Hinckel, Hélio Engholm Jr.

PESQUISA DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E TERMOFÍSICAS DOS PRODUTOS DE COMBUSTÃO DE BIOMASSAS 1769
C. M. Auth, R. L. Iskhakova.

DISEÑO DE UNA CELDA PARA MEDICIÓN DE COEFICIENTES DE DIFUSIÓN 1775
Georgina Díaz, Ximena Llanca.

TRANSPORT PHENOMENA IN PACKED BEDS

A LOCAL MODEL FOR A PACKED-BED HEAT EXCHANGER WITH A TWO-PHASE SOLID MATRIX .. 1781
Maria Laura Martins-Costa.

APRESENTAÇÃO DE UM MODELO-SIMULADOR DO TRANSPORTE DE SOLUTOS EM COLUNAS DE RECHEIO 1787
M. G. Novy Quadri, M. B. Quadri.

EXPERIMENTAL DETERMINATION OF TIME IN BIN COOLING FOR CORN AERATION: COOL-FRONT EVOLUTION 1793
A. M. Pagano, D. E. Crozza.

COMPARACION DE MODELOS DE REACTORES ENZIMATICOS DE DISPERSION AXIAL Y FLUJO PISTON COM DISTINTAS CINÉTICAS 1797
Carlos R. Carrara, Enrique J. Mammarella, Amelia C. Rubiolo.

TURBULENCE

EVOLUTION OF NONLINEAR INSTABILITIES IN RADIAL FLOWS 1803
J. C. Oliveira, Cristina H. Amon.

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO ESCOAMENTO EM UM DEGRAU COM O MODELO DE TURBULÊNCIA κ–ε RENORMALIZADO 1809
A. O. Nieckele, J. D. M. Abrunhosa, E. R. Ronzani.

TURBULENT FLOW IN PERIODIC INTERRUPTED-SURFACE PASSAGES 1815
Simone Sebben, B. Rabi Baliga.

ESCOAMENTO TURBULENTO EM TORNO DE UM CILINDRO PENDULAR 1821
Casimiro Cala, Antonio C. P. Brasil Junior, Aldo J. de Sousa.

ESTUDO COMPARATIVO ENTRE OS MODELOS DE TURBULÊNCIA k-ε E O MODELO ALGÉBRICO DO TENSOR DE REYNOLDS PARA ALTOS NUMEROS DE REYNOLDS UTILIZANDO O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS 1827
Marcelo J. Pirani, Manuel da S. V. de Almeida, Nelson Manzanares Filho.

THE ASYMPTOTIC STRUCTURE OF THE TURBULENT BOUNDARY LAYER WHEN SUBJECT TO AN INTERACTING SHOCK-WAVE 1833
Guilherme S. Terra, Jian Su, Atila P. Silva Freire.

A CONSISTENT ASYMPTOTIC SOLUTION FOR THE K AND EPSILON EQUATIONS FOR TRANSPIRED BOUNDARY LAYER FLOWS 1839
Mila Rosendal Avelino, Jian Su, Átila P. Silva Freire.

TRATAMENTO DA TURBULÊNCIA NA REGIÃO DA PAREDE 1845
H. D. Pasinato, Angela O. Nieckele.

THE LAW OF THE WALL FOR TWO-PHASE SOLID-LIQUID SYSTEMS 1851
Guilherme G. Camozzato, Atila P. Silva Freire.

UMA LEI DE POTÊNCIA PARA O COEFICIENTE DE ATRITO EM CAMADAS LIMITE EM EQUILÍBRIO, TURBULENTAS, COM GRADIENTE DE PRESSÃO 1857
Cláudio C. Pellegrini, Daniel O. A. Cruz.

THE STANTON NUMBER EQUATION NEAR A SEPARATION POINT 1863
Daniel O. A. Cruz, Atila P. Silva Freire.

TURBOMACHINERY

DISIPADOR RADIAL, ECUACIONES GENERALES Y VALIDACION 1869
Maria Luisa Olivero, Julián Aguirre-Pe.

ANÁLISE DE TURBINA DE REAÇÃO COM PÁ DE SIMPLES CURVATURA, UMA OPÇÃO PARA GERAÇÃO EM MICROCENTRAIS HIDROELÉTRICAS 1873
Frederico Fábio Mauad.

ANÁLISE DO ESCOAMENTO ROTACIONAL EM GRADES DE PLACAS PLANAS COM VORTICIDADE UNIFORME 1877
Nelson Manzanares Filho, Ramiro G. Ramirez Camacho.

A METHODOLOGY FOR AXIAL FLOW TURBOMACHINE DESIGN 1883
André L. Amarante Mesquita, N. Manzanares Filho, E. C. Fernandes.

ANÁLISE HIDRODINÂMICA DE ROTORES AXIAIS PARA APROVEITAMENTO DA ENERGIA CINÉTICA DOS RIOS 1887
C. J. C. Blanco, Marco S. A. Veludo Gouveia, André L. Amarante Mesquita.

AUTHORS

A

Abdulline, A. L. 281
Abreu, C. A. M. 787, 1201
Abreu, G. L. C. M. 417
Abreu, S. L. 1699
Abrunhosa, J. D. M. 1809
Acosta, A. 1281, 1287, 1291
Aedo, A. 813
Aguerre, R. J. 1235
Aguerrevere, J. 835
Aguiar Jr., W. B. 1381
Aguirre-Pe., J. 1869
Alarcón, M. 167, 975
Albizzati, E. D. 355, 1645
Alfano, O. M. 1645
Alhama, F. 167, 975
Almandoz, C. 1273
Almeida, M. S. V. 1551, 1557, 1827
Almeida, R. A. 207
Alsina, O. S. 1741
Alvarez, P. I. 305, 345
Amaral, M. 1273
Amborgi, A. 635
Amon, C. H. 61, 1803
Andrade Júnior, P. H. 1327
Andrade, A. L. 617, 871, 1239
Antohe, B. V. 923
Antón, R. 1273
Aquino, A. M. 1179
Arboés, L. C. D. 1011
Arese, A. 355
Arney, M. S. 1563
Assunção, V. F. 829
Assureura E., E. G. 405
Ataídes, I. F. 1115, 1321
Auada, R. B. 559
Auth, C. M. 1769
Avanza, J. R. 1155, 1161, 1167, 1205
Avelino, M. R. 1839
Azevedo, J. L. F. 49, 547, 553, 1173, 1399
Azevedo, L. F. A. 741, 1423, 1581

B

Balestieri, J. A. P. 459
Baliga, B. R. 1815
Ballesteros, A. 1191
Bambace, L. A. W 901
Bannwart, A. C. 1133, 1327
Barbieri, R. 103
Barbosa Jr., J. R. 1073
Barbosa, E. M. S. 747
Barbosa, J. R. 1505
Barea, F. 835
Bareyns R., R. 149
Barreto, A. A. 339
Barreto, G. F. 109
Barrientos, A. 231
Barroeta, C. 693
Basso, E. 49
Bastos, J. L. F. 1725
Bastos, S. 1753
Bastos-Neto, D. 237
Basualto, C. 1277
Bayón, J. J. G. 675
Bazzo, E. 889
Belandria, L. M. S. 145
Bello, J. B. 1405
Benachour, M. 787, 1201
Bernardo, L. Di 1357
Beyer, P. O. 817
Biage, M. 1321
Bilger, R. W 293
Bispo, D. J. 1339
Bizzo, W. A. 1109
Blanco, C. J. C. 1887
Blanco, R. L. D. 663
Blasco, R. 305
Boaventura, M. 583
Bodstein, G. C. R. 7
Bolivar, M. A. H. 723
Bonet, E. J. 1459
Bordalo, S. N. 1315
Borges, E. M. 1713, 1719

Bortolaia, L. A. 423
Bortoli, A. L. 517, 1605
Bortolus, M. V. 37, 589
Bortoni, E. C. 207
Bourguignon, E. 271
Bradbury, L. J. S. 1073
Braga, A. M. B. 1423
Braga, C. V. M. 1441, 1581, 1709
Braga, F. A. O. Q. 477
Braga, S. L. 985, 991, 1001, 1339, 1441
Brasil Junior, A. C. P. 1821
Braz Filho, F. A. 1713, 1719
Brazil, A. A. 1387
Briceño, J. F. 511
Brizuela, E. 127, 293
Bueno, A. D. 171, 177

C

Cabrera, M. I. 1143, 1149
Cadoche, R. S. 121
Cala, C. 1821
Calçada, L. A. 327
Calderón, M. 1411
Camacho, R. G. R. 1877
Cambra, S. T. 1453
Camozzato, G. G. 1369, 1851
Campderrós, M. 1287, 1291
Campo, A. 693, 699, 835
Campo, E. R. B. 447, 453
Carajilescov, P. 735, 1709, 1731
Carbonel H., C. 389
Cardoso, A. L. 1109
Carmo, E. G. D. 477, 493, 499
Carnero, M. 623
Carrara, C. R. 1797
Carrocci, L. R. 1179
Carvajal, C. L. 997
Carvajal, L. F. 571
Carvalho Jr., J. A. 219, 225, 237, 333
Carvalho, F. R. 213
Cassano, A. E. 1143, 1149
Castelo Filho, A. 523, 583
Castro, A. J. A. 1085
Celere, S. W. 1097
Cerqueira, S. A. A. G. 453
Cesco, J. 1281
Chaveau, C. 243
Chaves, L. G. 1545
Chávez, R.H. 1223
Cheroto, S. 717
Cheung, N. 969
Chiovetta, M. G. 121
Choudhury, D. 595
Clemente, R. A. 1393
Coelho, E. J. 1441
Colaço, M. J. 1033
Colle, S. 889, 1699
Cordeiro Jr., L. C. 895
Correa, H. A. 997
Correia, P. B. 829
Corria, M. E. 411
Cortez, L. A. B. 411
Costa, F. S. 275
Cotella, N. 1007
Cotta, R. M. 73, 723, 729
Coutinho, A. L. G. A. 471
Couto, H. S. 237
Crespo, R. S. 963
Creus, G. J. 115
Crozza, D. E. 1793
Cruz, D. O. A. 1857, 1863
Cuéllar, O. D. 1387
Cuminato, J. A. 523, 583
Cunha Neto, J. A. B. 155, 171, 177, 309, 775
Cunha, A. C. 1267
Cunha, A. R. 1345
Cunha, F. R. 1351, 1363, 1375

D

Dalabrida, L. 299
Dalepiane, S. 299
Delgado, M. 429
Delmas, A. 1677
Demin, A. B. 281
Devloo, P. R. B. 505
Dias, S. G. 1127
Díaz, Georgina 1775
Díaz, Gerardo 813
Diniz, A. J. 957
Doermann, D. 1661
Dourado, W. M. C. 553

Ducrós, E. 623

E

Ebinuma, C. D. 43
Echaniz, V. 293
Eggers, R. 635
Endres, L. A. M. 865
Engholm Jr., H. 1763
Esperança, G. A. S. 1103
Estenoz, D. 355
Esteves, A. 1693

F

Fabbri, M. 953
Fachini Filho, F. 1039
Favaretto, C. F. 1121
Fazenda, A. L. 953
Fernandes Fº, G. E. F. 803
Fernandes, E. C. 1883
Fernández-Seara, J. 853
Ferrari, M. 623
Ferrari, M. A. S. 1173
Ferreira, J. G. 1489, 1495
Ferreira, M. C. 605
Ferreira, V. C. S. 1121
Ferreira, W. F. 315, 321, 339
Fico Jr., N. G. C. R. 1399
Fidalgo, R. 699
Finzer, J. R. D. 611
Fiorelli, F. A. S. 1527, 1533
Fissore Sch., A. 149
Fontes, S. R. 67
Ford, J. T. 1429
Fortes, M. 339
Fraenkel, S. L. 333
Fraidenraich, N. 747
França, A. S. 487
França, F. A. 1127, 1569
França, F. H. R. 1655
Francisco G., E. 1649
Franco, A. T. 541
Frankenberg, C. L. C. 1753
Freire, A. P. S. 1369, 1833, 1839, 1851, 1863
Freire, J. T. 605
Frey, S. 481
Fusco, A. J. 1155, 1161, 1167
Fushimi, A. 201
Fygueroa S., S. J. 1029

G

Galeão, A. C. N. 389
Galetti, M. R. S. 735
Gallo, W. L. R. 195
Gama, R. M. S. 907
Ganzarolli, M. M. 541
Gao, E. 1429
Garcia, A. 969
Garcia, E. 711
Garcia, E. C. 1703
García, F. 847
Gaspari, E. F. 1315
Gavrilescu, C. O. 929, 941
Gely, M. C. 1217
Gerla, P. E. 641
Getino, L. H. 1505
Gimenez, A. M. 1627
Giner, S. A. 1217
Giorgetti, M. F. 67
Girardi, R. M. 1, 1399
Gobin, D. 991
Godoy, A. L. 1393
Góis, L. M. N. 1195
Gökalp, I. 243, 271
Goldstein Jr., L. 1109, 1655, 1687
Gomes, M. G. F. M. 1423
Gomes, M. S. P. 741
Gómez, M. G. 1191
Gonçalves, M. A. L. 1417
Gonzáles-Fernández, C. F. 167, 975
González, A. 1045
Gosman, A. D. 1599
Gouveia, M. S. A. V. 1887
Graber, T. A. 753. 763
Grau, R. J. 1143, 1149
Guedes, V. G. 13
Guerrero, J. S. P. 73
Guerrero, M. E. 1627
Guevara, C. 699
Guimarães, A. P. C. 1633
Guimarães, G. 1747
Guimarães, L. 1713

Güths, S. 1063, 1683
Gutiérrez, R. 1057

H

Hackenberg, C. M. 757, 935, 1453
Haghighi, K. 349, 487
Hall, T. J. 1563
Harada, S. 19
Henriquez, J. R. 1687
Hernandez H., D. 1029
Hernandez Neto, A. 1527
Hernandez, O. S. 401
Hildebrandt Jr., L. 1097
Hinch, E. J. 1351, 1375
Hinckel, J. N. 1763
Hirata, M. H. 7, 13
Holanda, C. A. M. 1523
Hombeeck, M. V. 465
Honma, H. 19
Hubinger, M. D. 657

I

Iglesias, J. 853
Iskhakova, R. L. 1499, 1769

J

Joseph, D. D. 1563
Jucá, P. C. S. 383
Juez, F. A. 699

K

Kakaç, S. 717, 729, 929, 941
Keine, S. 309
Keller, F. 611
Kent, J. H. 127
Khatchatourian, O. A. 287
Khol, R. 1007
Kieckbusch, T. G. 647
Kircher, D. 1441
Klein, E. 1017
Knoechelmann, A. 787, 1201
Kobayashi, W. T. 259
Koreeda, J. 19, 1763
Korzenowski, H. 547
Krenzinger, A. 1605
Krioukov, V. G. 281, 299
Künberger, J.-M. 929

L

Lacava, P. T. 219
Lacoa, U. 693, 835
Lage, J. L. 923
Lage, P. L. C. 253, 529, 535, 723, 1453
Lamberts, R. 155, 177
Larrosa R., C. G. 775
Laruccia, M. B. 1429
Lassue, S. 1067
Laurent, J. P. 917
Laurent, M. 1661; 1667, 1737
Lavrador, M. B. 1709
Lazarini, M. D. X. 85
Leite, R. M. G. 1517
Lema, A. 623
Lemos, L. F. 1683
Lemos, M. J. S. 1471
Lima, R. N. O. 441
Liñán, A. M. 1039
Livramento, M. A. 1345
Llagostera, J. 195, 435, 447
Llaguno, P. 1411
Llanca, X. 1775
Lodi, S. 293
Loula, A. D. 389
Lourenço, A. M. F. 1381
Luna, E. 1333
Luporini, S. 617

M

Machado, A. L. C. 1447
Machado, H. A. 1587
Maia, C. R. M. 957
Maiello, M.R. 441
Maliska, C. R. 383, 565, 963, 1345, 1477
Malta, D. S. H. 1201
Mammarella, E. J. 1797
Mansur, S. S. 1103

Mantelli, M. B. H. 797
Manzanares Fº, N. . . . 1885, 1827, 1877, 1883
Marchese, J. . 1273, 1281, 1287, 1291, 1295, 1299
Marcondes, F. 1477
Marczack, L. D. F. 769
Mariani, N. J. 109
Marinho, G. S. 1097
Marques, L. C. C. 1447
Martin V., M. J. 1029
Martinez, O. M. 109
Martins, A. L. 1381, 1435, 1465, 1483
Martins, G. 1245
Martins-Costa, M. L. 907, 1781
Marvillet, C. 1079
Massarani, G. 327
Mathur, S. 595
Mattea, M. 635
Mattos, B. S. 31
Mattos, H. S. C. 1593
Mauad, F. F. 1873
Mazucheli, J. 605
Mazza, G. D. 109
Mazza, M. G. G. 327
Mazza, R. A. 365
McClain, R. L. 841
McQuay, M. Q. 219, 687
Medeiros, A. L. R. 25
Medeiros, E. B. 85
Mello, P. 1017
Melo, C. A. 417
Mendes, N. 155
Mendes, P. R. S. 1575, 1581
Méndez, F. 1333
Mendonça, E. S. 823
Meneghini, J. R. 559
Menéndez, J. M. R. 1639, 1649
Menon, G. J. 371
Mesquita, A. L. A. 1883, 1887
Messias, L. S. 259
Mestroni, J. 201
Michou, Y. 271
Miguel, M. H. 647
Miranda, A. B. 1677
Mohamed R., M. 1687
Möller, S. V. 663, 865
Momesso, A. M. 1267
Montalvão, A. F. 1263
Montiel, G. 1205
Moraes Jr., P. 55, 1511
Moraga, N. 813
Morales, R. E. M. 681
Morandin, M. L. 1127
Moreira Jr., O. 1
Moreno, F. 1045
Moreno, J. 231
Moreno, R. G. 1057
Moreno, R. Z. 1459
Morgenstern Jr., A. 1511
Motta, S. Y. 1545
Mouallem, G. E. 1185
Moura, L. F. M. 1079
Moura, L. M. 1667
Muñoz, M. 1045
Murakami, J. 523
Muraoka, I. 883, 1517
Murthy, J. Y. 595

N

Naccache, M. F. 1575, 1581
Nakagawa, E. Y. 1327, 1569
Nascimento, M. A. R. 423
Nebra, S. A. 453, 1393
Negri, E. D. 121, 601, 1139, 1673
Neves F., L. C. 657
Neves, F. J. R. 1011
Nicolau, V. P. 1683
Nieckele, A. O. 577, 1339, 1581, 1809, 1845
Nóbrega, C. E. L. 1001
Nóbrega, P. L. 477
Nogueira, E. 729, 929, 941
Nogueira, L. A. H. 213, 333, 423
Nunes, M. H. 647
Nuñez, L. C. 763

O

Ochoa, N. 1295, 1299
Odeïde, A. 243
Oliphant, K. 687
Oliveira Filho, A. G. 253
Oliveira Junior, S. 465
Oliveira, A. B. S. 1011

Oliveira, G. L. 1051
Oliveira, J. C. 61, 1803
Oliveira, L. H. H. 1051
Oliveira, L. S. 349
Oliveira, S. G. 823
Oliveira-Fuentes, C. 429, 1251
Olivero, M. L. 1869
Orlande, H. R. B. 1033, 1587
Oviedo, O. 1007
Oyeneyin, B. 1429

P

Pacheco, P. M. C. L. 791
Pagano, A. M. 1793
Pagliero, C. 1295, 1299
Paiva, M. A. S. 1527
Palma, M. R. 1627
Panissi, D. L. 1551
Paone, N. 265
Paratori, C. 1277
Pares, J. 231
Parise, J. A. R. 877, 1545
Pasinato, H. D. 1845
Pássaro, A. 1719
Passos, J. C. 889
Peden, J. M. 1429
Pedras, M. H. J. 1417, 1471
Pedrini, A. 155
Peiretti, M. 623
Peixoto, R. A. 1527
Pellegrini, C. C. 1857
Pena, D. L. 1611
Pereira, A. G. 611
Pereira, A. J. C. 359
Pereira, E. B. 1699
Pereira, E. M. D. 1633
Pereira, F. O. R. 183
Pereira, J. A. F. R. 617, 1195, 1211
Pereira, J. T. V. 1245
Pereira, M. L. 85
Pereira, M. M. R. 377
Perez, C. 711
Pessoa, F. L. P. 823
Philippi, P. C. 155
Piacentini, R. D. 1645
Pieritz, R. A. 917
Pimentel, L. C. G. 729
Pinheiro, P. C. C. 189
Pinto, R. L. U. F. 37
Pirani, M. J. 1827
Pironti, F. 1191, 1309
Podowski, M. Z. 947
Portela, C. M. 1453
Pouey, M. T. F. 161
Pramparo, M. 623
Prata, A. T. 775

Q

Quadri, M. B. 913, 1787
Quadri, M. G. N. 781, 1787
Queiroz Neto, J. C. 1435
Queiroz, E. M. 757, 823
Queiroz, R. S. 377
Quiroga, O. D. 1155, 1161, 1167, 1205

R

Rabelo, A. P. B. 1211
Radevich, O. 1007
Ramírez, N. E. 1405
Ramos, M. D. 371
Ramos, R. A. V. 541
Ravagnani, S. P. 1229
Raynaud, M. 1737
Rebollo, D. 699
Reboredo, J. 711
Reinaldo, R. F. 1615
Reis, A. M. 1091
Reis, P. R. A. 1229
Revel, G. M. 265
Reyes, R. 693
Ribeiro, C. R. 1115
Ribeiro, G. S. 1563
Rios, J. R. T. 401
Rocamora, F. 1713
Rocha, A. C. B. 1097
Rocha, S. C. S. 1435
Rodrígues Filho, J. 1447
Rodrigues Jr., R. 669
Rodríguez, G. 115
Rodriguez, R.J. 1687

Rodríquez, J. L. 1627
Rojas, P. A. M. 103
Roma, W. N. L. 1357
Romani, R. 247
Romero, A. F. 1057
Romero-Méndez, R. 841
Ronchetti, A. 1411
Ronzani, E. R. 577, 1809
Roque, C. R. O. L. 7
Rosa, E. S. 365, 1127
Rosa, M. A. P. 947, 1713
Rosales, L. A. 133
Rossetti, G. 355
Rossi, L. F. S. 1133
Rovedo, C. O. 629
Roy, J. F. M. 1045
Rubiolo, A. C. 641, 651, 1797
Russo, C. 1263

S

Sá, C. H. M. 1381, 1435
Saastamoinen, J. 225
Saavedra O., C. 1539
Sabanai, H. J. 859
Saboya, F. E. M. 741, 1621
Saboya, S. M. 705, 1621, 1703
Sacadura, J.-F. 1667, 1677
Sáez, A. E. 1309, 1405, 1411
Saito, M. 1103
Sampaio, P.A.B. 471
Sánchez, J. F. L. 167, 975
Sanchez, M. 699
Santana, L. F. M. 359
Santana, M. L. M. 505
Santos, A. H. M. 207
Santos, C. A. 969
Santos, C. A. C. 97, 717
Santos, L. A. 565
Santos, L. C. C. 493, 499
Santos, M. B. 705
Santos, N. R. 79
Santos, R. L. A. 1581
Santos, V. M. S. 321
Sapag, J. 1277
Sattler, M. A. 161
Savi, M. A. 791
Scalon, V. L. 365
Schneider, P. S. 161
Schulz, H. E. 1267, 1357
Schulz, S. A. G. 1267
Schwarz, V. A. 1185
Sebben, S. 1815
Segnini, J. M. 1191
Segura, J. 847
Sen, M. 841
Sensale, B. 115
Shene, C. 345
Sichel, M. 275
Silva Neto, A. J. 809
Silva, A. 1257
Silva, A. J. 1369
Silva, C. B. C. 1417
Silva, E. 1551, 1557
Silva, E. E. 411
Silva, E. F. 73
Silva, E. M. V. 605
Silva, F. R. C. 787
Silva, J. A. 441
Silva, L. B. 395
Silva, M. G. P. 1465
Silva, M. L. 871
Silva, Ricardo J. 1303
Silva, Rogério J. 371
Silva, S. B. 657
Silva, S. M. M. L. 1747
Silva, Z. E. 1661, 1667, 1737
Silvares, O. M. 1527, 1533
Silveira Neto, A. 681, 1115
Sinay, L. 1179
Siqueira, L. P. 13
Siquier, S. 1411
Sircilli Neto, F. 1719
Soares, C. A. 1357
Soares, M. 1575
Sodré, J. R. 877, 1023
Sosa, J. G. 127
Sosa, M. E. 133
Sousa, A. J. 1821
Sousa, F. D. A. 259
Sousa, J. T. V. 1569
Souza, A. A. U. 1257
Souza, J. A. R. 935
Souza, J. L. F. 315

Souza, R. 359, 1369, 1387
Souza, R. R. 1211
Souza, S. M. A. G. U. 1257
Spilimbergo, A. P. 1499
Spim Junior, J. A. 969
Stampa, C. S. 985
Stegemann, D. 1085
Stocco, E. B. 459
Strachan, P. A. 139
Stragevitch, A. S. E. X. 1239
Su, J. 91, 1833, 1839
Suarez, C. 1235
Suástegui, A. O. 1223

T

Taboada, M. E. 753, 763
Tambourgi, E. B. 1195, 1211
Tapia, C. 1277
Teixeira, M. A. 1599
Terra, G. S. 1833
Tolaba, M. P. 1235
Tomasini, E. P. 265
Tomé, M. F. 523, 583
Traiano, F. M. L. 493, 499
Travelho, J. S. 953, 1091
Tremante, A. 711
Treviño, C. 1333
Trevisan, O. V. 1459

V

Valenzuela L., F. 1277
Valle, J. A. B. 1257
Valle, R. M. 1303
Varallo, A. T. 43
Varela, P. 1007
Vasconcellos, J. F. V. 565, 1345
Vázquez, M. 853
Vazzoler Júnior, H. 377
Veloso, M. A. 1757
Ventura-Medina, E. 1309
Venturini, O. J. 1557
Veras, C. A. G. 225
Vianna, J. N. S. 1011, 1051
Vieille, B. 243
Vieira, E. R. 1103
Vieira, G. M. R. 991
Vieira, L. C. 1447
Vieira, L. G. 1741
Vieira, M. E. 1615
Vielmo, H. A. 1605
Vilain, R. 1063
Villa, L. T. 1155, 1161, 1167
Villas-Boas, M. B. 1483
Viollaz, P. E. 629
Vlassov, V. V. 883, 895, 979
Vodianitskaia, P. 1527

W

Walter, A. C. S. 195
Webb, B. W. 687
Winandy, E. 1539
Winkelmann, F. C. 155
Wortmann, S. 97

Y

Yanagihara, J. I. 247, 669, 675, 859, 1091
Yang, K. T. 841
Yates, D. A. 1023
Yavanovich, M. M. 797

Z

Zalewski, L. 1067
Zambaldi, M. C. 1477
Zamora, M. 1191
Zaparoli, E. L. 705, 957, 1703
Zapata, L. A. 753
Zilletti, M. 623
Ziviani, M. 395, 1303
Zorrilla, S. E. 651

ABCM

ESTUDO EXPERIMENTAL DA INCLINAÇÃO DA SUPERFÍCIE FRONTAL EM MODELOS DE ÔNIBUS

Orlando Moreira Júnior e Roberto da Mota Girardi
Departamento de Engenharia Aeronáutica
Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)
12.228-900 - São José dos Campos - SP - Brasil

SUMÁRIO

O presente trabalho mostra a influência da inclinação da superfície frontal em modelos de ônibus, no valor dos coeficientes de arrasto, força lateral, momento de guinada e de pressão estática. A configuração da esteira próxima (característica de corpos rombudos), foi observada através de ensaios de visualização com fios de lã. Foram feitos ensaios para diferentes números de Reynolds e para ângulos de guinada entre -15° e 15°. O resultado mais significativo foi a redução de aproximadamente 20% no valor do coeficiente de arrasto, quando a inclinação frontal é de 40°.

INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é verificar a influência que a inclinação da superfície frontal de um modelo de ônibus tem sobre os coeficientes aerodinâmicos. Para tanto, foram feitas medidas de forças de arrasto, de força lateral, de momento de guinada, além da determinação das distribuições de pressão nas diversas superfícies do modelo. Para se compreender melhor o escoamento sobre veículos terrestres foram feitos ensaios de visualização.

Foram usados três modelos durante este trabalho. Estes modelos foram confeccionados em placas de madeira e baseado no modelo RSD da Mercedes Benz. Os três modelos variaram a inclinação da superfície frontal.

Para a realização dos ensaios de força e momento, foi especialmente construída uma balança de três componentes. A balança foi fixada a uma carenagem por onde também passaram os tubos de pressão do modelo. Essa carenagem foi fixa à mesa automobilística, a qual simulou o solo.

Nos ensaios de pressão foi utilizado um transdutor de pressão e duas válvulas seletoras. Cada modelo tem em média cinquenta e cinco tomadas de pressão. Adicionalmente foram colocadas oito tomadas de pressão na mesa automobilística.

Os ensaios de visualização foram realizados com fios de lã. Através desses ensaios foi possível descrever o escoamento em torno do modelo e na sua esteira, de forma aproximada.

Com esse estudo conseguiu-se identificar características que fizeram com que o Cd diminuísse em torno de 20%, o que na prática significa economia de combustível (Hucho, 1987) e consequentemente menor poluição ambiental, sendo esta a motivação principal deste trabalho.

DESCRIÇÃO DO APARATO E TÉCNICA EXPERIMENTAL

Foram usados três modelos para o estudo desse trabalho. Os três modelos diferem geometricamente apenas na inclinação da superfície frontal como visto na figura 1. O primeiro apresenta inclinação $\alpha = 0°$, o segundo $\alpha = 20°$ e o terceiro $\alpha = 40°$.

Os modelos foram confeccionados em placas de madeira e suas dimensões, vide tabela 1, foram baseadas no ônibus da **Mercedes Benz, modelo RSD**. Os modelos foram construídos em uma escala de 1/30. Essa escala foi baseada na área da seção transversal da seção de ensaio do túnel de vento (457 mm x 457 mm), de modo a minimizar o problema da interferência de suas paredes sobre os modelos. Ao final da construção dos modelos, verificou-se uma razão de bloqueio de 3,89%, ou seja, apenas 3,89 % da área útil da seção de ensaio do túnel de vento estava bloqueada devido o modelo. O arredondamento nas arestas dos modelos foi de R= 0,276 onde R é admensionalizado pela largura do modelo.

Tabela 1- Dimensões dos Modelos

Dimensão	Valores (mm)
L	72,6
H	105,7
C	392,4
F	10,0
D	76,5
E1	260,0
E2	290,0
S	10,5
T	21,0

Na tabela 1, L é a largura do modelo, H é a altura, C é o comprimento, F é o vão livre entre o modelo e o solo, D é a distância do eixo dianteiro à superfície frontal, E1 é a distância

do primeiro eixo traseiro à superfície frontal, E2 distância do segundo eixo traseiro à superfície frontal, S é a expessura do pneu e T é o diâmetro do pneu.

A mesa automobilística simulou o solo. Há várias maneiras de se fazer essa simulação (esteira rolante, mesa com sucção, entre outras). Optamos por um tipo de mesa automobilística que é uma chapa de madeira plana, sua parte frontal foi arredondada para que não houvesse descolamento do escoamento ao chegar no modelo. A escolha por esse tipo de mesa, foi devido a sua simplicidade, falta de recursos e tempo para construir um modelo mais fiel de simulação. Na mesa foram fixados fios de lã e colocadas oito tomadas de pressão. Essas tomadas de pressão localizaram-se debaixo dos modelos. Todas as tomadas de pressão localizadas nas superfícies do modelo saíam pelas rodas do mesmo e atravessavam a mesa automobilística entrando em uma carenagem de aço fixa à mesa. Além de servir de passagem para os tubos de pressão, a carenagem foi usada para fixação da balança, de modo a evitar que o escoamento interferisse nas medidas de força e momento.

Para os ensaios de força e momento, foi construída uma balança tipo "sting" e posteriormente colados sensores, extensômetros, na sua superfície. A balança foi projetada para medir três componentes (força de arrasto, força lateral e momento de guinada). O sinal elétrico que chega dos sensores, passa por um condicionador-amplificador de sinais, e finalmente é lido em um voltímetro. A balança foi calibrada através de um sistema de roldanas e massas padronizadas. A calibração é realizada pela metodologia apresentada por Nogueira , (1980).

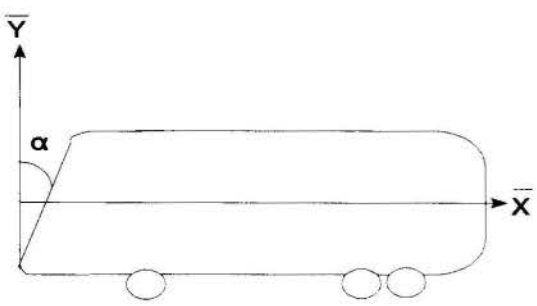


Figura 1- Ângulo de Inclinação da Superfície Frontal e Sistema de Coordenadas

Os ensaios de pressão estática, com tomadas nas superfícies dos modelos, foram realizados com um transdutor de pressão e duas válvulas seletoras, "scanivalve", cada uma com capacidade de quarenta e oito tomadas de pressão. Na superfície do modelo foram instaladas em média cinquenta e cinco tomadas de pressão. O transdutor de pressão foi calibrado através de um aparato formado por um reservatório de ar, manômetro de Betz (que tem como menor divisão 0,1 mm H_2O), condicionador-amplificador e um voltímetro.

Os ensaios de visualização foram realizados com fios de lã. Eles foram colados nas superfícies do modelo, na mesa automobilística e na ponta de uma haste metálica que foi usada para visualizar regiões de recirculação em torno do modelo e na sua esteira.

Para a realização dos ensaios seguiu-se o seguinte procedimento.

Os ensaios de força e momento foram repetidos três vezes para cada modelo, sendo tirada uma média símples dos três valores. Durante os ensaios de força, foram variados o número de Reynolds e o ângulo de guinada.

O momento de guinada teve como ponto de referência neste trabalho, o centro de gravidade (CG) do modelo, localizado no centro geométrico do mesmo. A dimensão usada para adimensionalizar o coeficiente do momento de guinada foi a distância entre o segundo eixo traseiro (E2) e o eixo dianteiro (Scibor-Rylski, 1975).

O número de Reynolds (Re) neste trabalho variou de $7{,}49 \times 10^4$ até $13{,}02 \times 10^4$. A incerteza no número de Reynolds é de $W_{Re} = 200$. O ângulo de guinada (β) variou de 0,0° até 15,0° sendo a variação de três em três graus. A incerteza nas medidas do ângulo é de 0,5°.

A realização dos ensaios de pressão por serem mais demorados foram repetidos duas vezes, sendo tirada uma média destes valores, e posteriormente plotados em gráficos de Cp x $\bar{x}$, onde $\bar{x}$ é a distância admensionalizada pela largura do modelo, vide figura 1.

Durante a realização dos ensaios de pressão a variação do ângulo de guinada foi -15,0°, -6,0°, 0,0°, 6,0° e 15,0°, e usado um único número de Reynolds Re = $13{,}02 \times 10^4$.

RESULTADOS

Como pode ser visto na figura 2, a variação do número de Reynolds não alterou os valores de Cd, já que as diferenças detectadas estão dentro da incerteza das medidas ($W_{Cd} = 0{,}01$).

Analisando ainda a figura 2, encontra-se uma significativa queda no valor do coeficiente de arrasto, quando a inclinação da superfície frontal do modelo é de 40 graus. A diferença é de aproximadamente 20% e permanece praticamente inalterada com o aumento do valor do número de Reynolds.

Observa-se na figura 3, mais uma vez, a redução do valor do coeficiente de arrasto do modelo 3 (α = 40°) frente aos modelos 1 e 2. A diferença permanece praticamente constante a medida que se aumenta o valor do ângulo de guinada (β).

A inclinação de 40 graus da superfície frontal, modelo 3, apresenta um coeficiente de arrasto menor frente aos modelos 1 e 2 em toda faixa de ângulos testada. Já o modelo com inclinação de 20 graus, apresenta-se eficiente, frente ao modelo 1, apenas com ângulo de guinada acima de 9 graus.

A força lateral e o momento de guinada não sofreram influência significativa com a variação da inclinação da superfície frontal, o que é um bom resultado, já que com a inclinação conseguiu-se diminuir o valor do Cd sem que se altere os coeficientes que medem a estabilidade do veículo, como mostram as figuras 4 e 5. A medida que esses coeficientes aumentam, aumenta-se também a instabilidade, já que a força lateral e o momento de guinada são desestabilizantes (Scibor-Rylski, 1975).

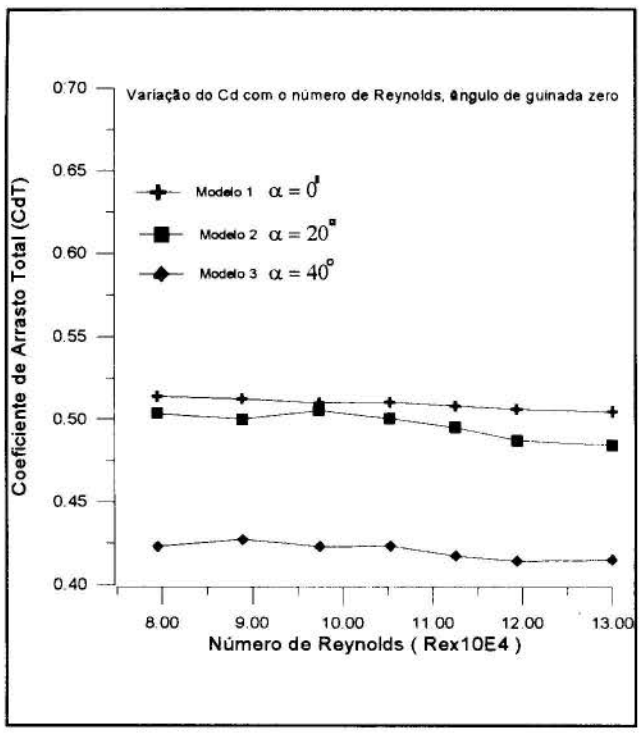


Figura 2- Variação do coeficiente de arrasto com o número de Reynolds, para $\beta = 0°$

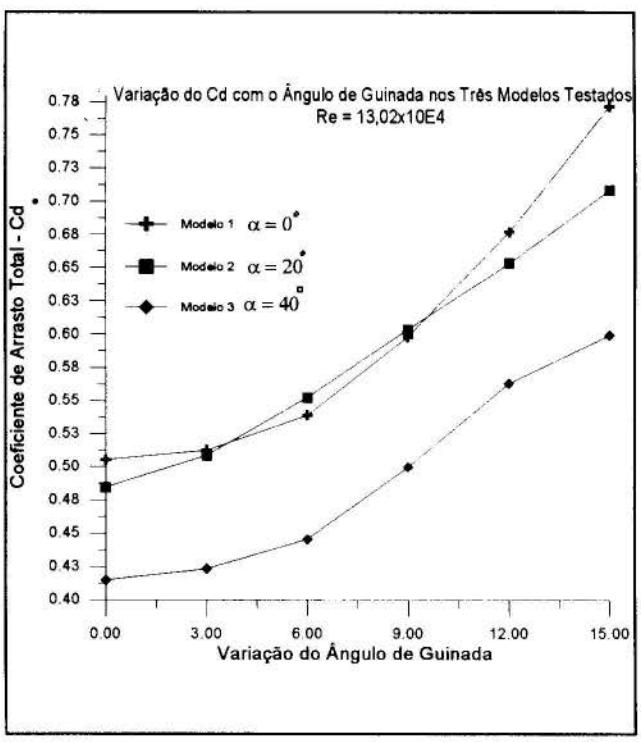


Figura 3- Variação do coeficiente de arrasto com o ângulo de guinada, para Re = $13{,}02 \times 10^4$

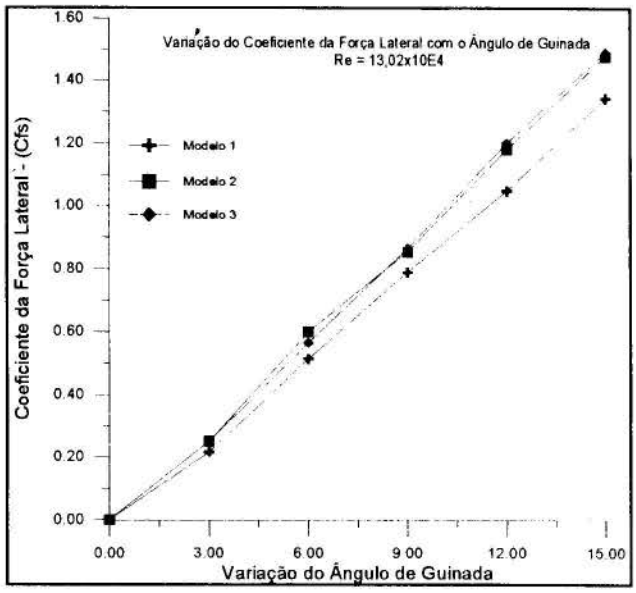


Figura 4- Coeficiente da força lateral x ângulo de guinada, para Re = $13{,}02 \times 10^4$

Através das medidas de pressão na base dos modelos, pode-se determinar o coeficiente de pressão na base (Cp_b), que é obtido através de uma média ponderada dos valores de pressão medidos nas diversas tomadas de pressão, instaladas na superfície traseira do modelo. Os pesos desta média ponderada são os elementos de área que contém uma tomada de pressão. Neste caso, pode-se considerar que os valores apresentados na tabela 2 fornecem o chamado coeficiente de arrasto de base.

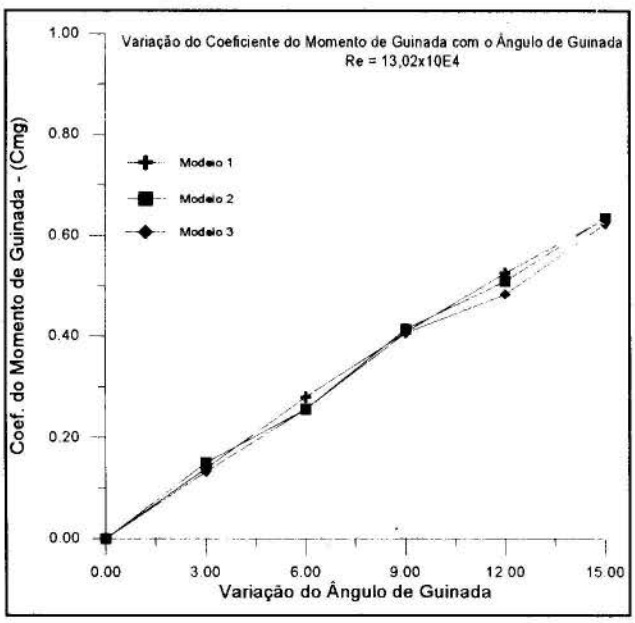


Figura 5- Coeficiente do momento de guinada x ângulo de guinada, para Re = $13{,}02 \times 10^4$

Em primeiro lugar, deve-se observar que o (Cp_b) fica mais negativo a medida que o ângulo de guinada aumenta (vide Tabela 2). Este resultado esta relacionado com os valores do coeficiente de arrasto, mostrados na figura 3. Para um mesmo valor de ângulo de guinada, pode-se verificar que a inclinação da superfície frontal não tem influência sobre o Cp_b para β até 6°. Para β=15°, ocorre uma variação acentuada para o modelo 1. Esta variação parece estar vinculada com as diferenças nos valores de Cd entre os modelos 1 e 2, quando β esta entre 9° e 15°. Os resultados discutidos acima indicam a necessidade de experimentos adicionais para se determinar o Cp_b para toda faixa de ângulos estudada neste trabalho. A incerteza nas medidas do Cp_b é de 0,01.

Tabela 2- Variação do Cp_b na base

Modelo	Cp_b médio β= 0°	Cp_b médio β = 6°	Cp_b médio β =15°
1	-0,07	-0,11	-0,28
2	-0,07	-0,10	-0,20
3	-0,07	-0,11	-0,19

Na superfície frontal, os valores de Cp são menores em todas as tomadas de pressão localizadas na linha central vertical do modelo 3, quando comparados com os modelos 1 e 2, como observa-se na figura 6. Pode-se verificar que a região de estagnação esta localizada na parte central da superfície frontal para o modelo 1, quando α = 0°. A medida que aumenta a inclinação da superfície frontal ocorre um deslocamento desta região para baixo (vide figura 6). Esta informação tem grande importância na instalação do radiador do veículo.

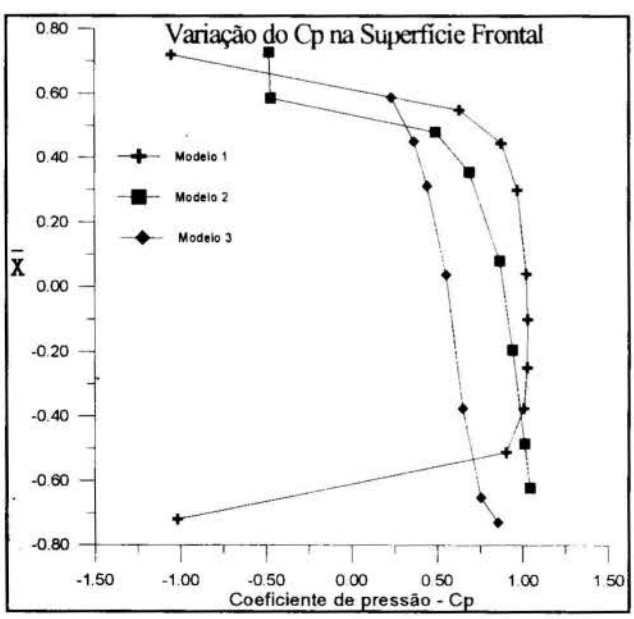


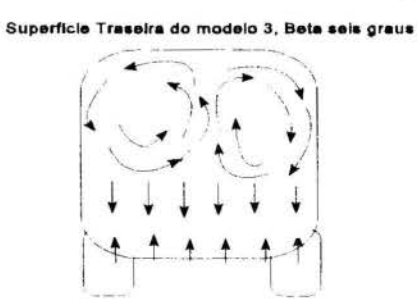
Figura 6- Comparação dos Valores de Cp entre os três modelos

Durante a visualização com fios de lã notou-se que a intensidade e o tamanho das regiões de recirculação na superfície traseira do modelo 3 foram as menores, seguindo em ordem crescente para os modelos 2 e 1quando β= 0°.

Houve também variação da estrutura das regiões de recirculação que caracterizam a esteira, quando variou-se o ângulo de guinada (β). Nos três modelos, a estrutura da esteira era formada por dois vórtices, quando β = 0° ,ver figura 7 . Esses vórtices variaram de tamanho e intensidade mas não na sua forma. O vórtice superior é criado pela camada de cisalhamento livre que se solta da superfície superior, o vórtice menor é formado pelo escoamento que sai do canal formado pelo assoalho do modelo e a mesa automobilística, seu tamanho e intensidade são menores devido a menor velocidade e vazão que sai do canal (Câmara, 1993).

Figura 7- Descrição do escoamento em torno dos modelos1, 2 e 3 , β=0°

(A)



(B)

Figura 8- Resultado da visualização do modelo 3, β= 6° .(A) Vista lateral. (B) Vista da superfície traseira

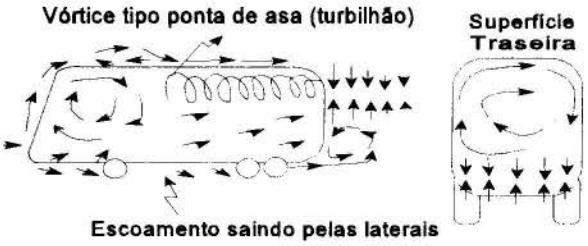


Figura 9- Descrição do escoamento em torno dos modelos 1, 2 e 3, $\beta = 15°$.

Nas superfícies laterais, quando $\beta = 0°$, as regiões de recirculação são simétricas nos três modelos. O modelo 1 foi o que apresentou a maior região de recirculação seguido do modelo 2. Isso mostra mais uma vez a influência do valor da inclinação frontal na característica do escoamento sobre os modelos.

Na superfície superior ocorre também a redução da região de recirculação a medida que se aumenta o ângulo de inclinação.

Para $\beta = 6°$, os modelos 1 e 2 apresentam a mesma estrutura na superfície traseira, apresentada na figura 7, porém com valores de Cp mais negativos na base do modelo, vide tabela 2,. e regiões de recirculação mais intensas. Neste caso, como esperado, não há mais simetria nas regiões de recirculação das superfícies laterais.

Ainda para $\beta=6°$, o modelo 3 apresenta uma configuração nova, de três vórtices, como pode ser visto nas figuras 8 (A) e 8 (B). Os dois vórtices superiores, figura 8(B), tem seus eixos alinhados à direção do escoamento não perturbado (V_{oo}), e o terceiro vórtice tem seu eixo normal à direção de V_{oo} e é esquematizado na figura 8(A). Após a região de recirculação na superfície lateral, o escoamento recola parcialmente, ficando parte da superfície com um vórtice tipo ponta de asa (turbilhão) que vai até o fim do modelo em direção à esteira para formar a nova configuração (figura 8(A)).

Quando o modelo encontra-se com $\beta = 15°$, há um novo rearranjo na estrutura dos vórtices na esteira. Isso foi verificado nos três modelos. Essa nova estrutura é formada por dois vórtices, um localizado na parte superior da superfície traseira, mais intenso (ver vista traseira da figura 9), e outro na parte inferior, menos intenso, que gira no sentido anti-horário, devido ao escoamento que sai do canal formado pela mesa automobilística e a superfície inferior do modelo, como pode ser visto na figura 9 vista lateral.

CONCLUSÃO

Os valores do coeficiente de pressão na superfície traseira dos modelos ficaram mais negativos a medida que o ângulo de guinada foi aumentado. Esta variação está relacionada com o aumento do coeficiente do arrasto quando incrementa-se o valor de β, como pode ser observado na figura 3.

Verifica-se uma diminuição significativa, de aproximadamente 20%, quando a inclinação da superfície frontal variou de 20° para 40°. Este resultado é muito importante, pois segundo Hucho (1987), para um ônibus deslocando-se com uma velocidade de 100Km/h em uma rodovia plana, esta redução no valor do Cd implicaria em uma economia de aproximadamente 10% de combustível, e essa economia permanece mesmo quando o ângulo de guinada é variado, sendo isto importante na prática, porque existe quase sempre, vento na direção perpendicular ao movimento do veículo.

A visualização do escoamento mostrou modificações da estrutura dos vórtices localizados na esteira dos modelos. Estas modificações não puderam ser explicadas. Medidas adicionais, utilizando-se anemometria de fio quente estão em fase de andamento para obter-se mais subsídios, de forma a entender-se o complexo escoamento que se estabelece na esteira de veículos que exibem características de corpos rombudos. Além disto, pretende-se fazer visualizações em um canal hidrodinâmico, de modo a melhorar o entendimento sobre o escoamento na esteira de veículos.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

REFERÊNCIAS

Hucho, W. H. et all, 1987, "Aerodynamics of Road Vehicles", Butterworths Co.

Scibor-Rylski, A. J., 1975, "Road Vehicle Aerodynamics", Whitefriars Press Limited

Câmara, E. F., 1993, "Estudo do Escoamento sobre o Modelo de um Ônibus", Tese de Mestrado, ITA

Nogueira , L. S., 1980, "Calibração de Sistemas de Múltiplas Componentes com Interações", Tese de Mestrado, ITA

Merzkirch, W., 1987, "Flow Visualization", Academic Press, Inc.

ABSTRACT

In the present work, it is obtained the influence of the frontal surface slope of bus models on the drag, side force and yaw moment coefficients, as well as on the pressure coefficient on the model surfaces. Flow visualizations, using wool tuffs, is performed in order to understand the flow behavior over such kind of bluff body. Experiments were done in different Reynolds numbers and the yaw angle was varied between -15° and 15°. The most significant result was a reduction of approximately 20% in the drag coefficient, for a frontal surface with 40° slope.

SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO AO REDOR DE UM CILINDRO RETANGULAR COM UMA FRESTA UTILIZANDO O MÉTODO DE VÓRTICES

Carlos R. O. L. Roque, Miguel H. Hirata, Gustavo C. R. Bodstein
Programa de Engenharia Mecânica - COPPE/UFRJ
Caixa Postal 68503
21945-970 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil

RESUMO

O Método de Vórtices é utilizado para a simular o escoamento externo a um cilindro de seção retangular, que é dotado de uma fresta longitudinal. Considera-se que o escoamento é inviscido no interior da fresta. Para o escoamento externo, utiliza-se uma versão do método de vórtices na qual o corpo é simulado por uma distribuição de vórtices com densidade variando linerarmente nos paineis. Valores do coeficiente de arrasto e do número de Strouhal são calculados e apresentam boa concordância quando comparados com valores disponiveis na literatura.

INTRODUÇÃO

A análise do escoamento ao redor de corpos rombudos torna-se, a cada dia, uma tarefa de importância crescente nos projetos de engenharia, como atestam as atividades de exploração do petróleo no mar, os projetos para a determinação de cargas aerodinâmicas em grandes construções, torres e linhas de transmissão, os projetos de novos veículos, etc.

Ao contrário do escoamento ao redor de um corpo aerodinâmico, o escoamento ao redor de um corpo rombudo é extremamente complexo e apresenta muitas questões em aberto. Junto à parte anterior do corpo o escoamento é potencial e a distribuição de pressão pode ser facilmente calculada; nesta região a camada limite desenvolve-se normalmente, mantendo sua espessura pequena e concentrando toda a vorticidade gerada na superfície do corpo. As complexidades manifestam-se principalmente na parte posterior do corpo, onde se verifica o aumento da espessura da camada limite e o fenômeno da separação. Desta forma, a vorticidade é lançada no meio fluido, formando uma região de intensa vorticidade a jusante do corpo, denominada esteira.

Se o corpo for poroso as complexidades de análise aumentam, uma vez que todo o escoamento se modifica nas vizinhanças de sua superfície. Na parte anterior do corpo a superfície porosa muda completamente a configuração das linhas de corrente, uma vez que o fluido penetra através dela. Este fluido é lançado de volta na região posterior do corpo, modificando o comportamento da esteira, que é em parte re-energizada. O escoamento interno (ao corpo) apresenta, também, suas complexidades (é um escoamento num meio poroso).

Não resta dúvidas, portanto, que o escoamento ao redor de um corpo poroso de formas rombudas apresenta-se extremamente complexo e com muitos aspectos ainda não completamente esclarecidos, exigindo esforços adicionais de pesquisa. Um dos modelos mais simples de corpo poroso com forma rombuda pode ser formulado supondo que este é representado por um conjunto de placas planas paralelas umas às outras e orientadas no sentido do escoamento; desta maneira os espaços entre as placas representam os poros por onde o fluido se movimenta. Araujo e Hirata (1993), com o objetivo de estimar a força de arrasto sobre um conjunto de "risers" de produção de petróleo, utilizaram este modelo exprimindo o coeficiente de porosidade em função da espessura das placas e da espessura dos poros. Os bons resultados obtidos serviram de motivação a este trabalho, que tem por objetivo a análise mais detalhada de alguns aspectos localizados. Roque (1994) realizou testes em tunel de vento com o objetivo de levantar do campo de pressão na superfície do corpo (inclusive no interior da fresta) e o calcular o coeficiente de arrasto. Corpos rombudos formados por dois blocos retangulares dispostos paralelamente e alinhados com o escoamento, como explicado acima, foram utilizados. Neste trabalho apresenta-se a simulação numérica do mesmo problema. Com o desenvolvimento do algoritmo e os bons resultados obtidos, os objetivos tornam-se mais amplos: além da motivação inicial, verifica-se a possibilidade de se análisar o escoamento em corpos com frestas, o efeito do solo na aerodinâmica de veículos, o desempenho de defletores aerodinâmicos, etc.

A análise numérica do problema tirou proveito das peculiaridades da forma do corpo. Por possuir forma rombuda, o corpo forma uma esteira bastante generosa que concentra toda a vorticidade gerada; desta maneira a utilização do método de vórtices apresenta-se como uma alternativa atraente. Na presente versão o corpo é simulado com a utilização do método de painéis, distribuindo-se vórtices com densidade variando linearmente no interior dos painéis; este fato facilita a especificação da circulação em cada parte do corpo. Uma nuvem de vórtices discretos é utilizada para simular a vorticidade da esteira; lança-se mão da lei de Biot-Savart para calcular a velocidade induzida por um vórtice sobre os demais, na simulação lagrangiana do processo de convecção da vorticidade. O processo de difusão é simulado utilizando o método do avanço randômico.

No interior da fresta, assumiu-se que o escoamento é potencial uma vez que o modelo de Poiseuille conforme proposto por Roque (1994) não é adequado.

Com o intuito de testar as modificações introduzidas no algoritmo, simulações com cilindros retangulares (b/h=2) sem fresta foram efetuadas e os resultados comparados com dados disponíveis, apresentando boa concordância nos coeficientes de arrasto e sustentação e na frequência de emissão de vórtices.

Os resultados das simulações numéricas com cilindros com fresta foram feitos com $b/h_1=4$ e variando-se o tamanho da fresta $\Delta h/b=3$, 5 e 7 % (ver figura 1). A comparação com os dados experimentais mostrou a necessidade de se implementar um modelo viscoso na fresta.

FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O Problema Físico. A figura 1 define a geometria do corpo, as grandezas de interesse e o sistema de coordenadas utilizado.

Supondo que o fluido é newtoniano, com viscosidade constante e que o escoamento realiza-se com velocidades suficientemente baixas para que os efeitos da compressibilidade possam ser desprezados, o campo de velocidades é solenoidal e o princípio da conservação da massa é representado pela equação da continuidade na forma

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{1}$$

e o princípio de conservação da quantidade de movimento é representado pela seguinte versão da equação de Navier-Stokes

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{u}, \tag{2}$$

onde **u** é o campo de velocidade, p é a pressão e ν é a viscosidade cinemática do fluido.

Para completar a definição do problema assume-se que a velocidade incidente **U** é uniforme e orientada no sentido positivo de x, e, sobre a superfície do corpo, a condição de aderência é expressa por

$u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ condição de impenetrabilidade,

$u_s = \mathbf{u} \cdot \mathbf{s} = 0$ condição de escorregamento nulo.

onde **n** e **s** são os vetores normal e tangencial, respectivamente, à superfície do corpo.

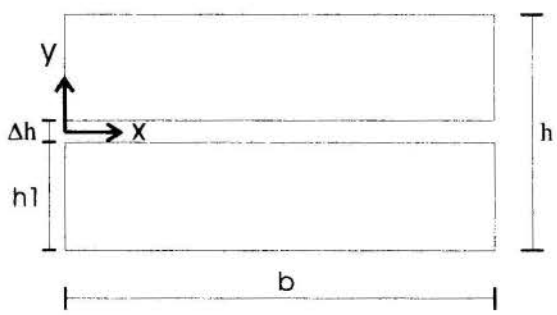


Figura 1 - Geometria e definições

Formulação Básica do Método de Vórtices. Ao se trabalhar com o método de vórtices é mais interessante utilizar a equação da vorticidade. Tomando-se o rotacional da equação de Navier-Stokes e utilizando a equação da continuidade obtém-se:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\omega = \nu\nabla^2\omega \tag{3}$$

Com relação a esta equação é importante observar que ela corresponde à versão bidimensional e, portanto, ω representa apenas a componente ω_z da vorticidade normal ao plano do escoamento. Observa-se também que, com esta operação, o termo de pressão foi eliminado. O lado direito da equação representa os efeitos da viscosidade e é responsável pela difusão da vorticidade; se este termo se anular a equação da vorticidade resultante corresponde a equação de Euler, que governa o processo de convecção. Estas observações formam a base do método de vórtices (Hirata, 1991, e Sethian, 1991). Segundo este método o transporte da vorticidade, representada por uma nuvem de vórtices discretos, realiza-se através de dois processos independentes: o processo lagrangiano da convecção dos vórtices discretos e o processo de difusão viscosa.

Escoamento Externo. Como o corpo possui formas rombudas, o escoamento externo foi simulado numericamente utilizando o método de vórtices.

No processo de convecção, a velocidade em um ponto (x,y) do campo externo é expressa como

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}^c + \sum_j \mathbf{u}_j^v \tag{4}$$

onde **U** é a velocidade do escoamento incidente, $\mathbf{u}^c$ representa a contribuição devido a presença do corpo e $\mathbf{u}_j^v$ a contribuição de do vórtice j.

Para o cálculo da contribuição devido à presença do corpo, foi utilizado o método dos painéis com algumas características que melhoram o seu desempenho quando comparado com versões previamente utilizadas por Araujo e Hirata (1993) e Moreira da Silva, Hirata e Bodstein (1996). Para a sua implementação a superfície do corpo foi divida em N painéis sobre os quais foram distribuidos vórtices, cuja densidade varia linearmente (no interior do painel); garante-se a igualdade da densidade, nas extremidades dos painéis, mas não a igualdade das derivadas, Roque (1996). A variação linear da densidade dos vórtices facilita sobremaneira a imposição da continuidade da pressão nos pontos de separação. Nestes, a densidade vortical não é contínua havendo aí um salto que é determinado de maneira que a equação de Bernoulli seja satisfeita com igualdade de pressão antes e depois da separação. A equação de Helmholtz é imposta para cada corpo. Esta equação é fundamental para a continuidade da pressão, visto que os vórtices emitidos tem importante contribuição na velocidade calculada no ponto de separação e na especificação da circulação ao redor do corpo.

No cálculo da velocidade induzida pelos vórtices discretos foi utilizada a lei de Biot-Savart com o vórtice desingularizado, dotando-o de um núcleo. Com este procedimento as velocidades infinitas dos vórtices potenciais são removidas.

A velocidade de convecção, calculada no vórtice p é expressa por

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{U} + \mathbf{u}^c + \sum_{j\neq p} \mathbf{u}_j^v \tag{5}$$

e a convecção é efetuada com um esquema simples de primeira ordem.

O processo de difusão viscosa é simulado da maneira tradicional, adicionando-se um deslocamento randômico $\zeta=(\xi,\eta)$ ao já descrito para a convecção (Lewis, 1991). Assim os processos de convecção e difusão são resumidos como:

$$\mathbf{x}_p^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_p^t + \mathbf{u}_p(\mathbf{x},t)\Delta t + \zeta \tag{6}$$

O escoamento ao redor de um corpo com arestas vivas separam-se nestas arestas. Utilizou-se este fato para reduzir o número de vórtices discretos e, consequentemente, reduzir o tempo computacional (o número de operações varia com o quadrado do número de vórtices). Em cada incremento de tempo um novo vórtice é criado nas vizinhanças de cada ponto de separação; a intensidade de cada vórtice é expressa por

$$\Gamma_p = \tfrac{1}{2}u_s^2\Delta t \tag{7}$$

onde u_s representa a velocidade tangencial no ponto de controle do painel adjacente, a montante do ponto de separação; para os vórtices nascentes na saída da fresta, toma-se u_s igual a velocidade do último painel da fresta. Com este procedimento cria-se, em cada incremento de tempo, apenas seis novos vórtices (nas duas arestas da frente, nas duas traseiras e nas duas arestas da saida da fresta), mas não se conseque satisfazer a condição de escorregamento nulo. Esta aproximação tem produzido bons resultados com uma boa economia do tempo computacional, uma vez que seriam necessários N (número de paineis) vórtices novos em cada incremento de tempo, se a condição de aderência plena fosse satisfeita.

O Escoamento Interno. O trabalho experimental de Roque (1994) mostrou que o gradiente da pressão no interior da fresta era praticamente constante em todos os casos estudados. Estes resultados sugeriram que o escoamento de Poiseuille poderia ser um bom modelo para o problema interno . Neste caso, a velocidade média no interior da fresta é dada por

$$\overline{V} = -\frac{\Delta h^2}{12\mu}\frac{\Delta p}{b}. \qquad (8)$$

Como Roque não mediu o perfil de velocidade no interior da fresta podemos avaliar a velocidade média nesta região utilizando seus dados experimentais com a fórmula acima. Para $Re = 40000$ e $\Delta h/b = 0.05$, temos

$$\overline{V} = 6.0\,U. \qquad (9)$$

O resultado acima mostra a inviabilidade de se modelar o escoamento interno por Poiseuille uma vez que é inviável velocidades tão altas na fresta. O presente modelo para o escoamento interno é inviscido. Admite-se que no interior da fresta o escoamento é potencial separando-se na saida da fresta. As paredes da fresta são modeladas por uma distribuição linear de vórtices e a separação é simulada pela emissão de vórtices na saída da fresta.

RESULTADOS

Para testar o desempenho do presente modelo do escoamento externo, o qual utiliza vórtices com densidade variando linearmente sobre os painéis, resultados numéricos foram obtidos para um cilindro de seção retangular de razão $(b/h) = 2.0$, sem fresta. Utilizou-se uma malha regular com 60 painéis e o incremento de tempo adimensional foi de $\Delta t = 0.05$. O número de Reynolds foi de 40000.

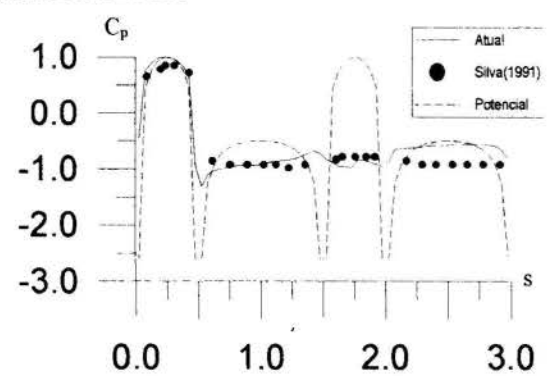


Figura 2 - Distribuição de C_p na superfície do corpo sem fresta

Os resultados obtidos servem para aferir a eficiência das modificações introduzidas. A figura 2 ilustra a boa concordância dos valores calculados do coeficiente de pressão, C_p, quando comparados com dados experimentais. A diferença encontrada nas superfícies laterais pode ser justificada lembrando que os valores numéricos são instantâneos, ao passo que a grande inércia dos instrumentos de medida suavizam os valores, aproximando-os de seu valor médio.

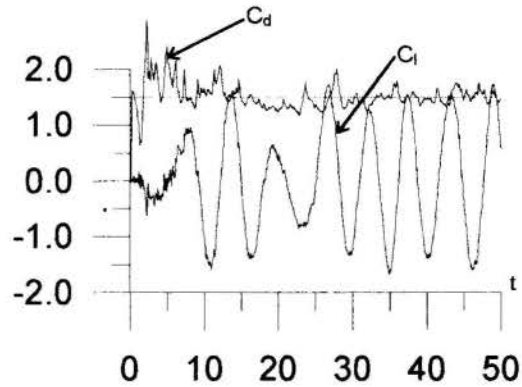


Figura 3 - Evolução temporal de C_d e C_l para o corpo sem fresta

A figura 3 serve, então, para ilustrar a capacidade da simulação numérica de capturar as variações rápidas das grandezas e mostra o comportamento temporal dos coeficientes de sustentação e arrasto, C_l e C_d respectivamente. O coeficiente de arrasto oscila ao redor de um valor médio que, calculado no intervalo de tempo 15 a 50, é representado pela linha pontilhada. A Tabela 1 mostra a boa concordância do valor obtido com relação aos dados disponíveis na literatura.

Tabela 1: Comparação de valores de C_d para o corpo sem fresta; $b/h = 2.0$

	C_d
Kamemoto (1994) - numérico	1.50
Hayashi (1990) - experimental	1.55
Resultado atual - numérico	1.50
Blevins (1984) - experimental	1.60
Silva (1991) - experimental	1.45

O coeficiente de sustentação, como era de se esperar, oscila ao redor do valor nulo. Na figura fica claro que este sinal possui uma frequência dominante, caracterizada pela oscilação da esteira. Uma análise de Fourier resulta na figura 4, que mostra o espectro de frequência do sinal de C_l. Com o valor da frequência correspondente ao pico do gráfico foi calculado o número de Strouhal, St, cujo valor é mostrado na Tabela 2.

A comparação do valor do número de Strouhal calculado com dados disponíveis na literatura (numéricos), mostra boa concordância. Não foi possivel encontrar dados experimentais para a configuração testada e, por esta razão, mostra-se na Tabela 2 o valor disponível, que corresponde a uma razão b/h=1.0

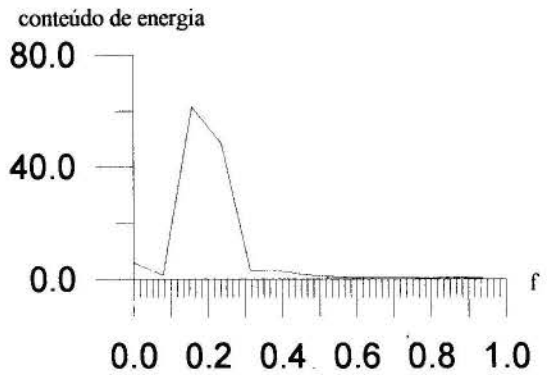


Figura 4 - Espectro de frequência de C_l para o corpo sem fresta

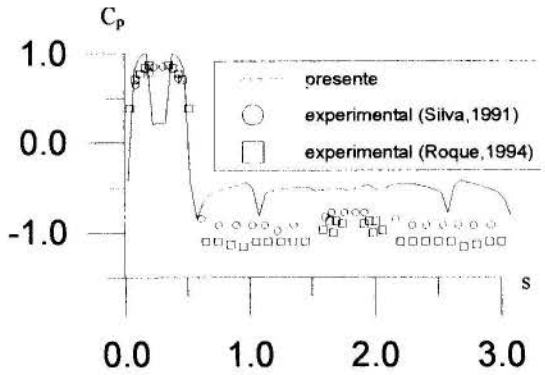


Figura 6 - Distribuição de C_p na superfície do corpo com fresta

Tabela 2: Comparação de valores de St para o corpo sem fresta; b/h = 2.0

	St
Kamemoto-numérico	0.080
Resultado atual	0.078
Blevins-experimental (b/h=1.0)	0.120

Finalmente, a figura 5 mostra o comportamento da esteira. Esta figura representa a configuração da esteira, congelada no instante correspondente a $t = 1000\Delta t$.

Para analisar o corpo com fresta, a sua superfície foi dividida em 104 painéis de igual comprimento, distribuídos inclusive no interior da fresta. Foram simuladas, numericamente, várias configurações de fresta, isto é, diferentes valores da razão $\Delta h/b$. Verificou-se que o modelo adotado é capaz de capturar as grandezas globais do escoamento externo, como os coeficientes de arrasto e sustentação, assim como a energização da esteira (compare as figuras 5 e 8). Como já mencionado, há necessidade de se aprimorar o modelo do escoamento interno, levando-se em conta as perdas associadas à viscosidade; este fato fica claro na análise da esteira, onde se verifica uma excessiva energização, e no cálculo da velocidade no interior da fresta. Esta deficiência parece estar influindo na distribuição do coeficiente de pressão que, embora qualitativamente boa (mostra, inclusive, aspectos não detectados nos dados experimentais - vide a parte anterior do corpo), mostra certa discrepância nos valores, como ilustra a figura 6, um exemplo típico com b/h_l=4 e $\Delta h/b$=0.05.

Para as condições da figura, a análise de Fourier permite estimar o valor do número de Strouhal como sendo St=0.15.

A figura 7 mostra o comportamento do coeficiente de arrasto em função do tamanho da fresta. Os valores são comparados com os resultados experimentais de Roque (1994). Verifica-se que o comportamento geral dos valores calculados acompanha os dados experimentais, embora sejam sistematicamente menores. Este fato pode ser atribuído à excessiva energização da esteira, como já citado. É importante mencionar, também, que os valores experimentais apresentam incerteza, uma vez que eles foram obtidos por integração do campo de pressão que, como mostra a figura 6, não é a metodologia mais indicada.

Cabe, finalmente, mencionar que as figuras 5 e 8 mostram configurações instantâneas da esteira. Embora estas configurações sejam bastante ilustrativas, não há dúvidas de que as animações com sequências instantâneas da esteira são capazes de ilustrar com uma riqueza maior de detalhes a dinâmica do desenvolvimento da esteira.

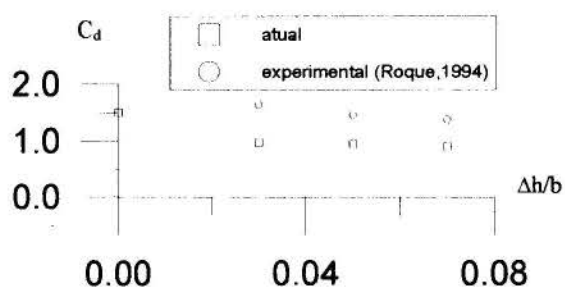


Figura 7 - Coeficiente de arrasto versus tamanho da fresta

Figura 5 - Esteira após 1000 Δt para o corpo sem fresta; b/h=2.0

Figura 8 - Esteira após 1000 Δt para o corpo com fresta; $b/h_1=4.0$ e $\Delta h/b=0.05$

REFERÊNCIAS

Araujo, M. R. O. P. e Hirata, M. H., 1993, "Analysis of the Flow Around a Bluff Porous Body by Discrete Vortex Method", *Anais, XI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica (COBEM)*, Brasília, DF, Vol. 2, pp. .

Blevins, R. P., 1984, "Applied Fluid Dynamics", Van Nostrand Reinhold Company, N.Y.

Hayashi, M. e Aso, S., 1990, "Numerical Simulations of separeted Flows around Bluff Bodies by Discrete Vortex Method", *Memoirs of the Faculty of Engineering, Kyushu University*, Vol. 50, No.3, September, pp. .

Hirata, M. H., 1991, "Análise do Escoamento de um Fluido Viscoso Utilizando Elementos da Teoria Potencial: O Método de Vórtices", *Palestra proferida no I Congresso Norte Nordeste de Engenharia Mecânica*, Natal, RN, (publicado também como: Textos em Mecânica dos Fluidos Nº 01/91 Lab. Mec. Fluidos-Aerodinâmica, PEM-COPPE/UFRJ).

Kamemoto, K., 1994, "Development of the Vortex Methods for Grid-Free Lagrangian Direct Numerical Simulation", *Proceedings, 3rd JSME-KSME Fluids Engeneering Conference*, July 25-27, Sendai, Japan.

Lewis, R. I., 1991, "Vortex Element Methods for Fluid Dynamic Analysis of Engineering Systems", Cambridge University Press.

Silva, M. N.M., Hirata, M. H. e Bodstein, G. C. R., 1996, "A Utilização do Método de Vórtices na Análise do Escoamento ao Redor de Corpos Rombudos", *Anais, IV Congresso de Engenharia Mecânica Norte-Nordeste*, Recife, PE, pp. 855-859.

Roque, C. R. O. L., 1994, "Estudo Experimental do Escoamento ao Redor de um Cilindro Retangular com uma Fresta", Trabalho de Graduação, Departamento. de Engenharia Mecânica, UFRJ.

Roque, C. R. O. L., 1996, "Simulação Numérica do Escoamento ao Redor de um Cilindro Retangular com uma Fresta", Tese de Mestrado a ser apresentada ao Programa de Engenharia Mecânica, COPPE/UFRJ.

Sethian, J., 1991, "A Brief Overview of Vortex Methods", in Vortex Methods and Vortex Motion, edited by K.E. Gustafson and James Sethian, SIAM.

Silva, M. N. M., 1991, "Estudo do Escoamento ao Redor de Cilindros Retangulares Submetidos a Diferentes Ângulos de Ataque", Trabalho de Graduação, Departamento. de Engenharia Mecânica, UFRJ.

SUMMARY

The vortex method is used to simulate the external flow around a cylinder with rectangular cross section, which has a longitudinal gap. We assume the flow to be inviscid inside the gap. For the external flow we use a version of the vortex method where the body is represented by a vortex distribution that varies lineraly over the panel length. Calculated results for the drag coefficient and for the Strouhal number present good agreement when compared to experimental and numerical results available in the literature.

ABCM

FORÇA DE ARRASTO EM CORPOS ROMBUDOS DE FORMAS COMPLEXAS (UTILIZAÇÃO DE LÓGICA FUZZY E ALGORITMOS GENÉTICOS)

Vanessa G.Guedes, Leandro P. de Siqueira e Miguel H. Hirata
Lab. de Mecânica dos Fluidos-Aerodinâmica
PEM-COPPE/UFRJ
21 945-900 - Rio de Janeiro - Brasil

RESUMO

A determinação da força de arrasto que atua sobre corpos rombudos de formas complexas é de interesse nos projetos de engenharia. A determinação experimental desta força é onerosa e a sua estimativa utilizando as ferramentas numéricas tradicionais é limitada e exige tempo e máquinas poderosas. Neste trabalho, apresenta-se uma alternativa para a estimativa desta força, com a utilização da lógica "fuzzy" combinada com os algoritmos genéticos. O algoritmo desenvolvido é extremamente rápido, não exige máquinas poderosas e apresenta a vantagem de se aperfeiçoar com a sua utilização.

INTRODUÇÃO

A análise do escoamento ao redor de um corpo de formas aerodinâmicas simples e a determinação das grandezas de interesse associadas a este escoamento podem ser consideradas como bem estabelecidas. Devido as complexidades introduzidas pelo fenômeno da separação e pela esteira viscosa, o mesmo não pode ser afirmado quando o corpo possui formas rombudas e complexas.

Uma análise, mesmo que superficial, revela, nos problemas de engenharia atuais, uma predominância de situações em que se pode identificar um corpo de formas rombudas ao redor do qual um fluido se movimenta.

Caracteriza-se, assim, a necessidade de se direcionar esforços para o desenvolvimento de procedimentos que possibilitem a análise deste tipo de escoamento e a determinação das grandezas de interesse, como as cargas aerodinâmicas, por exemplo. Os avanços que se observam na área computacional faz prever que as técnicas numéricas representarão alternativas bastante atraentes para a análise do escoamento ao redor de corpos rombudos; estes avanços ocorrem tanto no desempenho das máquinas como nos algoritmos utilizados. De fato, o aumento do desempenho das máquinas viabiliza a utilização de métodos como o método dos elementos finitos, das diferenças e dos volumes finitos, etc. (que utilizam uma descrição euleriana com malhas extremamente complexas) e o método de vórtices (que utiliza a descrição lagrangeana). Mais ainda, o desenvolvimento da computação paralela agiliza sobremaneira estes métodos e permite que novos algoritmos e métodos sejam desenvolvidos, como por exemplo as técnicas conhecidas como "cellular automata". Deve-se observar, porém, que se hoje já se consegue analisar o escoamento ao redor de corpos de formas simples, a tarefa ainda é gigantesca quando as formas são complexas; a situação torna-se mais complicada quando o escoamento é tridimensional.

O que se observa, no entanto, é que em boa parte das aplicações não se exige a análise detalhada do escoamento, mas apenas algumas grandezas a ele associadas. Como exemplo, pode-se citar a força de arrasto que, em muitas aplicações, é a única grandeza que se precisa conhecer. Nestes caso, técnicas e procedimentos alternativos podem apresentar resultados imediatos e de boa qualidade. Este trabalho representa um esforço nesta direção; utiliza-se a lógica fuzzy e algoritmos genéticos para se estimar o coeficiente de arrasto de corpos com formas complexas. Este esforço tem como produto um algoritmo que permite estimar a força de arrasto, atuante em corpos de formas complexas, com uma precisão suficiente para as aplicações de engenharia. O processo de estima da força de arrasto é extremamente rápido e dispensa cálculos complexos ou experimentos custosos para a descrição do escoamento, do campo de pressão, etc. A estimativa é efetuada utilizando o conhecimento subjetivo que se tem dos fenômenos físicos (expertise, leis físicas, raciocínios) que são previamente traduzidos em regras explicitadas a priori; dados eventualmente disponíveis são usados para melhorar o desempenho do algoritmo. A utilização de algoritmos genéticos permite que os procedimentos sejam modificados, atuando de acordo com os resultados obtidos para que estes melhorem a cada uso do algoritmo.

Uma configuração complexa, composta de um cilindro e um disco montados coaxialmente , é testada com bons resultados. Verifica-se que, além de proporcionar uma maneira rápida para se estimar a força de arrasto, os procedimentos permitem a identificação de fenômenos não previstos e que aparentemente não fazem parte do conhecimento acumulado até então.

RESUMO TEÓRICO

Cargas Aerodinâmicas. A ação de um fluido sobre um corpo, que através dele se movimenta, manifesta-se através da tensão que, integrada sobre a superfície deste corpo, resulta na força aerodinâmica, representada por **F**. Como indicado na figura (1), costuma-se decompor esta força segundo duas direções perpendiculares: a componente na direção do escoamento (portanto oposta ao sentido deste) recebe o nome de força de arrasto e é representada por **D** enquanto que a componente na direção perpendicular ao escoamento recebe o nome de força de sustentação e é representada por **L**. As letras F, D e L são utilizados para representar as intensidade destas forças.

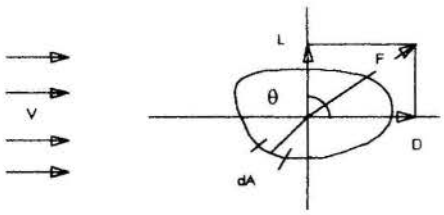


Figura 1 - Força aerodinâmica

Uma análise dos mecanismos envolvidos no fenômeno mostra que a seguinte equação formal pode ser escrita:

F=F(forma, tamanho, orientação, prop.do fluido, prop. do escoamento)

Se a forma do corpo não variar e se as condições

H_1 - o fluido escoa de maneira incompressível
H_2 - o regime é permanente

forem observadas, pode-se simplificar a equação acima e reescreve-la como

$$F=F(l, \alpha, r, \mu, V)$$

onde : l = dimensão característica, α = ângulo de ataque (medido em radianos), ρ = massa específica, μ = coef. de viscosidade e V = velocidade característica.

O teorema de Buckinghan e a lei da homogeneidade dimensional permitem escrever a equação adimensional equivalente

$$C_F=C_F(\pi_1,\pi_2,...,\alpha, Re) \qquad (1)$$

onde $C_F = \dfrac{F}{\frac{1}{2}\rho V^2 l^2}$ = coeficiente de forca

$$Re = \frac{\rho V l}{\mu}$$

e π_1, π_2 ...são grupos adimencionais que definem a forma do corpo.

Dos textos de Mecânica dos Fluidos verifica-se que a tensão no fluido pode ser representada por:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + d_{ij}$$

onde a função delta de Kronecker é definida como $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$ Nesta equação, o primeiro termo do lado direito refere-se à pressão e está associado à componente normal (para simplificar este termo será representado apenas por -p-), enquanto que o segundo termo engloba os efeitos da viscosidade e está associado às componentes tangenciais da tensão (será indicado por -τ-) Desta maneira tem-se que:

$$D = \int p\cos\theta dA + \int \tau\sin\theta dA \qquad (2.A)$$

$$L = -\int p\sin\theta dA + \int \tau\cos\theta dA \qquad (2.B)$$

Em particular, para a força de arrasto, pode-se inferir que esta seja composta de duas contribuições: a força de arrasto associada às componentes tangenciais - D_f - e a força de arrasto associada a componente normal - D_p-. Em geral, o termo D_f assume valores pequenos porque o número de Reynolds para a maior parte dos escoamentos de interesse é muito alto. No entanto, para corpos de formas esbeltas (asas, placa plana, etc.) ou se o número de Reynolds assumir valores pequenos, a força de arrasto será composta praticamente desta parcela. O termo D_p é conhecido como força de arrasto de forma uma vez que a sua dependência da forma do corpo e da orientação deste com relação ao escoamento é grande. Das expressões (2), acima, pode-se inferir que, para os casos de interesse deste trabalho, tem-se como boa aproximação:

$$D_P = \int p\cos\theta dA \qquad (3)$$

Nos escoamentos para os quais há um predomínio das forças de inércia sobre as viscosas, o que é caracterizados por um alto valor do número de Reynolds, a contribuição do arrasto de forma é predominante na força de arrasto total. Se o número de Reynolds for alto e, ainda, se o corpo possuir formas rombudas a força de arrasto praticamente se confunde com a componente de forma; a componente D_f assume um valor muito pequeno quando comparado com o valor da componente D_p, podendo ser desprezada.

Fazendo-se um paralelo com a expressão (1), pode-se definir o coeficiente (adimensional) de arrasto como

$$C_d = \frac{D}{1/2V^2l^2} \qquad (4)$$

que, para escoamentos ao redor de corpos rombudos caracterizados por valores elevados de Re pode ser, aproximadamente, calculada substituindo D por D_p da expressão (3), ou seja

$$C_d = \frac{\int p\cos\theta dA}{1/2V^2l^2} \qquad (5)$$

onde, nestas condições, a pressão depende fracamente de Re. Conclui-se, portanto, que se o corpo é rombudo e Re assume valores elevados, o coeficiente de arrasto é, praticamente, independente de Re. O coeficiente de arrasto depende praticamente da distribuição de pressão sobre a superfície do corpo e da orientação desta com relação à direção do escoamento.

A distribuição da pressão na parte a montante do corpo praticamente coincide com a distribuição da pressão se o escoamento fosse potencial, porém, muda drasticamente após a separação. Nesta região separada, em contato com a esteira viscosa, a pressão mantém-se praticamente constante e é denominada de pressão de base. Esta pressão de base pode ter seu valor modificado pela presença de corpos a jusante, um fato

muito importante e explorado na redução da força de arrasto com a utilização de corpos de formas complexas.

Fuzzy. Fuzzy Sets e Fuzzy Logic são termos que, a cada dia, tornam-se mais comuns em diferentes áreas do conhecimento e suas aplicações. Na área tecnológica, em particular, estes termos já se encontram incorporados aos produtos de última geração e que são utilizados no dia a dia. Por paradoxal que pareça, no entanto, estes termos e todo o conhecimento associado tem sidos explorados muito aquém de suas potencialidades, na Engenharia Mecânica, a ponto de não se ter, ainda, palavras ou expressões, em português, que traduzam os termos acima referidos. Neste trabalho a palavra "fuzzy" será utilizada.

Talvez, o *Princípio da Incompatibilidade* (Zadeh, 1965) possa induzir e ilustrar o porque da utilização dos conjuntos e lógica fuzzy em problemas como o abordado neste trabalho. Este princípio diz: *"as the complexity of a system increases, our ability to make precise and yet significant statements about its behavior diminishes until a threshold is reached beyond which precision and significance become almost mutually exclusive characteristics".* Nesta altura é interessante relembrar a introdução e o item sobre cargas aerodinâmicas para se ter uma ordem de magnitude das dificuldades envolvidas na proposta mais ampla do trabalho.

O conhecimento subjetivo é normalmente ignorado nos projetos de engenharia de ponta, onde as ferramentas de trabalho são compostas de conhecimentos objetivos (modelos matemáticos, por exemplo); no entanto, este conhecimento (informações linguísticas não mensuráveis como por exemplo a experiência de um especialista) é usado com muita frequência na avaliação destes projetos. O que se propõe, com o enfoque deste trabalho, é que estas duas formas de conhecimento possam ser harmonicamente utilizadas na solução de problemas reais e a lógica fuzzy é a ferramenta que a viabiliza .

Para que se apresente a proposta de trabalho é necessário alguns conceitos e definições. Aqui, apresenta-se apenas um resumo e para uma introdução ao assunto recomenda-se o livro de Ross, 1995.

A teoria de conjunto fuzzy é uma generalização da teoria dos conjuntos, com a finalidade de representar matematicamente o conceito de vago ou de algo definido com uma fronteira vaga. Enquanto que, na teoria de conjunto clássica, associada ao conjunto A, define-se $\mu_A(x)$ => função de pertinência (função característica) tal que $\mu_A(x) = 0$ se $x \notin A$ e $\mu_A(x) = 1$ se $x \in A$, (isto é a função de pertinência assume apenas dois graus de pertinência: zero e um), a função de pertinência $\mu_F(x)$ de um conjunto fuzzy pode assumir qualquer valor no intervalo [0,1] e representa uma medida do grau de similaridade do elemento do conjunto. A idéia é muito simples: uma pessoa com uma altura um pouco menor que 1,8m pertence ao subconjunto das pessoas baixas e outra pessoa com uma altura um pouco maior que 1,8m pertence ao subconjunto das pessoas altas; isto se os conceitos tradicionais de conjunto forem utilizados. Com os conjuntos fuzzy cada uma dessas pessoas podem pertencer simultaneamente aos dois subconjuntos com graus de pertinência entre 0 e 1. Uma consequência imediata deste fato é que a lógica fuzzy permite que se viole a *lei de não-contradição,* isto é, uma pessoa pode pertencer simultaneamente aos dois conjuntos. Outro fato a se observar é que a soma dos graus de pertinência não precisa ser obrigatoriamente igual a unidade.

Os operadores lógicos comumente utilizados em lógica fuzzy são: **and, or e not** . Estes operadores atuam sobre as funções de pertinência; por exemplo, no caso de "**A and B** " o retorno corresponde ao $\min(\mu_A, \mu_B)$, no caso de "**A or B** "o retorno corresponde ao $\max(\mu_A, \mu_B)$ e "**not A** " retorna $(1- \mu_A)$.

Com estes operadores as regras fuzzy são montadas; uma regra típica seria por exemplo.

"**IF** (A is Small) **AND** (B is Medium) **THEN** (C is Big) "

Os sistemas fuzzy, assim como os sistemas tradicionais são compostos por regras. Nestes as regras começam a atuar quando a premissa é verdadeira ou acima de fator de confiança, com os sistemas fuzzy as regras atuam com diferentes intensidades dependendo do grau de confiança de cada premissa. O conjunto de regras pode ser compactado numa matriz relacional, também conhecida como memória associativa. Se cada linha da matriz corresponde a um valor de A e cada coluna a um valor de B, então o valor "Big", na regra acima identifica-se com a linha "Small" e a coluna "Medium.

Os métodos de inferência fuzzy são usados para decidir como combinar as premissas em uma única regra fuzzy e, depois, como combinar os resultados das regras que possuem a mesma variável como resultado. Existem algumas alternativas (Lee,1990) para se escolher os métodos de inferência. Em Lee 1990, utiliza-se o método de inferência conhecido como (max-min) e que é ilustrado graficamente na figura (2).

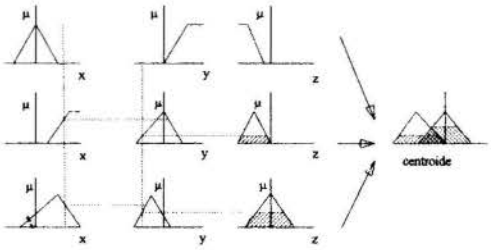


Figura 2 - Inferência e defuzificar

Como os métodos de inferência fuzzy mapeiam subconjuntos fuzzy a subconjuntos fuzzy, em geral, há a necessidade de se providenciar um "defuzificador", que vai providenciar o mapeamento de um subconjunto fuzzy em um número. Novamente, várias alternativas para o "defuzificador" existem (Ross,1995). A alternativa utilizada no trabalho é conhecida como o método do centróide e é ilustrado graficamente na figura (2)

Algoritmos Genéticos. Algoritmos genéticos (GA) fazem parte da classe de técnicas de procura que se caracterizam pela robustez e simplicidade mecânica de sua aplicação; os GA efetuam uma procura inteligente num espectro infinito de soluções ao invés de se restringir a procura a um domínio finito onde os resultados são esperados. Estas características são aqui aceitas porque uma discussão sobre estas e outras características associadas aos GA fogem ao escopo deste trabalho; aos interessados recomenda-se a leitura de Goldberg, 1989.

Estes algoritmos, pode-se dizer, utilizam os conceitos da Teoria da Evolução de Darwin, os quais enfatizam o fato de que a existência dos seres vivos está relacionada com a regra de sobrevivência pela adaptação

e que novos seres ou classes aparecem através dos processos de reprodução, permutação genética e mutação entre os elementos (Forrest,1993); nos GA estes conceitos adptam-se para serem utilizados numa linguagem computacional. Cria-se, inicialmente, um número finito de possíveis soluções do problema (população ou geração inicial), cujo desempenho é testado individualmente. Uma parte das boas soluções são selecionadas e as demais são descartadas. As soluções selecionadas são submetidas aos processos de reprodução, permutação genética e mutação para criar a nova população ou geração de soluções, das quais se espera um desempenho melhor do que aquele da geração inicial. Este processo é repetido até se obter o objetivo desejado.

Nos GA o conjunto de variáveis do problema é codificado como uma cadeia finita e concatenada de bits, ou cromossomos. Na verdade esta cadeia é formada por subcadeias ou genes, representando, na forma binária, o valor da variável a ela associada. A cadeia de bits é, portanto, uma combinação de algarismos zero e um (veja figura (3)). Assim sendo a população inicial é representada por n cadeias (n é o número de variáveis) de igual comprimento e, como cada cadeia representa uma possível solução do problema, pode-se determinar o desempenho desta solução (o valor de adaptação ou função objetivo).

O processo de reprodução, ou operador reprodução, consiste em selecionar as cadeias de melhor desempenho e garantir que estas sejam copiadas na geração seguinte. Desta maneira garante-se que as melhores soluções (cadeias) persistam e contribuam para a formação de novas soluções nas próximas gerações. Por questões computacionais práticas, deve-se controlar o tamanho da população e, um dos mecanismos usados consiste em se descartar, na geração seguinte, as soluções de menor desempenho.

O processo (ou operador) de permutação genética permite que permutações sistemáticas de informações entre cadeias sejam efetuadas utilizando decisões probabilísticas. Como ilustra a figura (3), a permutação genética entre duas cadeias é efetuada através dos seguintes passos:

- determina-se randômicamente um local em ambas as cadeias;
- a parte inicial da primeira cadeia (formada pelas subcadeias anteriores ao local determinado randomicamente) é unida com a parte final da segunda cadeia (formada pelas subcadeias posteriores ao local determinado randomicamente) para formar a primeira nova cadeia resultante do processo de permutação genética;
- o que restou da primeira cadeia, ou seja, a sua parte final é unida com a parte inicial a segunda cadeia para formar a segunda nova cadeia resultante do processo de permutação genética.

Desta maneira informações entre cadeias são trocadas e partes de boa qualidade são combinadas e permutadas.

Os operadores de reprodução e de permutação genética são os responsáveis pela maior parte do poder dos GA. No entanto, nem sempre estes dois operadores possuem a capacidade de obter a solução ótima. Por exemplo, no processo de criação de uma população pode ocorrer que toda a população de cadeias esteja destituida de uma informação vital para se obter a solução mais correta ou ótima (o número 0 na décima posição, para exemplificar); as futuras gerações jamais teriam esta informação se apenas os operadores de reprodução e de permutação genética fossem utilizados. Nestas situações é que o operador mutação se torna importante. Este operador identifica randomicamente uma posição na cadeia e inverte o valor, isto é, se nesta posição existir o número 1 , este é substituído pelo número 0, e vice versa. Mimificando a natureza, o processo de mutação deve ocorrer muito raramente nos GA.

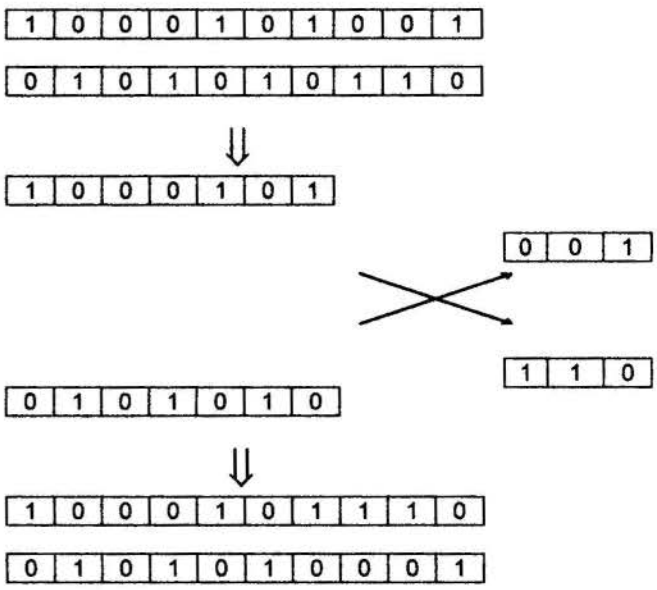


Figura 3 - Processo de permutação genética

Outros operadores mais avançados existem e podem ser incorporados nos GA (Goldberg, 1989), mas os três operadores mencionados são os mais importantes e mais comumente utilizados.

Neste trabalho os GA foram utilizados na geração das funções de pertinência mais apropriadas ao problema, como descrito abaixo.

CARGAS AERODINÂMICAS

Coeficiente de Arrasto. Num projeto de engenharia, que envolve o movimento de um corpo num fluido, a determinação das cargas aerodinâmicas, em particular a determinação da força de arrasto, é a atividade mais importante. Como discutido na Introdução, a determinação da força de arrasto que atua em corpos de forma rombuda é muito difícil. O grau de dificuldade é aumentado quando o corpo não possui formas simples.

Neste trabalho, apresenta-se os resultados preliminares, que estão sendo desenvolvidos visando a estimativa da força de arrasto de corpos rombudos de formas complexas. Para a estimativa da força de arrasto são utilizados técnicas que incluem a lógica fuzzy e os GA. A forma do corpo escolhida é definida na figura (4). Esta configuração apresenta algumas vantagens, neste estágio de desenvolvimento da técnica; o corpo rombudo, apresenta uma forma bastante complexa de modo que a mudança de alguns parâmetros altera substancialmente o comportamento do escoamento e dados experimentais estão disponíveis para que se possa aferir os resultados e orientar os desenvolvimentos futuros. No presente estágio, decidiu-se que seria mais prudente restringir a atenção aos escoamentos caracterizados por Re altos; influiu nesta decisão o fato de se dispor de resultados experimentais apenas nesta faixa (Blevins, 1984).

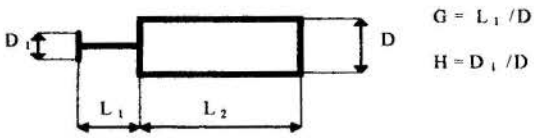


Figura 4 - Geometria e definições

Nas condições estabelecidas a equação (1) pode ser escrita como:

$$C_D = f(G,H)$$

onde, como definido na figura, G representa a separação entre o corpo principal (o cilindro) e o disco montado co-axialmente à sua frente e H a razão entre os diâmetros.

Cada uma das grandezas da equação acima foi definida como variável linguística assumindo os valores

ÈB (extremamente baixo), MB (muito baixo), BA (baixo), ME (médio), AL (alto), MA (muito alto) e EA (extremamente alto).

com as respectivas funções de pertinência como ilustrados na figura (5). Observe que cada função de pertinência fica definida por apenas três valores; a função de pertinência associada a EB fica definida pela tríade (a1,b1,c1), aquela associada a MB por (a2,b2,c2), por exemplo.

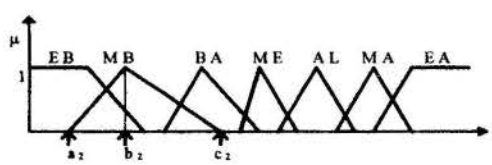


Figura 5 - Funções de pertinência

As regras fuzzy, definidas pela matriz relacional abaixo, representam as informações linguísticas que se tem sobre os mecanismos responsáveis pela força de arrasto que atua sobre o conjunto cilindro + disco. Estas informações traduzem o que foi discutido no item (2.1): a força de arrasto nas condições do problema, confunde-se com a força de arrasto de forma e esta resulta da distribuição da pressão sobre a superfície do corpo. Com estas premissas e lembrando que Re é elevado, pode-se inferir qualitativamente o comportamento da pressão na superfície do corpo, em função da geometria, das linhas de corrente, da posição e forma da esteira, etc.

Tabela 1 - Matriz relacional

G \ H	EB	MB	BA	ME	AL	MA	EA
EB	EA	EA	EA	MA	MA	ME	EA
MB	EA	EA	AL	AL	AL	MB	EA
BA	EA	MA	ME	AL	MB	EB	EA
ME	MA	AL	BA	BA	EB	EB	EA
AL	AL	ME	BA	BA	MB	EB	EA
MA	MA	AL	BA	BA	BA	MB	EA
EA	MA	AL	ME	ME	ME	AL	MA

RESULTADOS

As tríades que definem as funções de pertinência foram inicialmente assumidas de acordo com os conhecimentos linguísticos e alguns dados disponíveis para C_D.

Os resultados obtidos foram surpreendentemente bons do ponto de vista qualitativo, apresentando, porém, resultados discrepantes para algumas condições, quando comparados com os dados experimentais. A análise destas condições mostra que algum fenômeno físico inesperado ocorre e que não conseguimos ainda explicar.

Ao se efetuar estas comparações, o algoritmo guarda os valores estimado e real (obtido experimentalmente) e, após um número pré-determinado de comparações, as funções de pertinência são redefinidas com o auxílio do GA., garantindo, desta maneira, que os valores estimados melhorem com o uso do algoritmo. A geração inicial era composta de 10 cadeias (ou cromossomos) com 21 sub-cadeias (ou genes). Os melhores cromossomos de cada geração (50%) foram escolhidos para a permutação genética, enquanto que apenas 10% de cada geração foram reproduzidos na geração seguinte. Como a geração inicial era pequena e como a taxa de crescimento permitida foi de 10% com um limite máximo de 20 elementos por geração, adotou-se uma porcentagem relativamente alta de elementos (10%) para sofrerem o processo de mutação

Tabela 2 - Valores reais e estimados do coeficiente de arrasto

G	H	C_D (Real)	C_D (Estimado)	ERRO %
1.50	0.125	0.57	0.58	1.75
1.50	0.500	0.32	0.33	3.12
1.50	1.000	0.63	0.61	3.17
1.00	0.125	0.53	0.58	9.43
1.00	0.500	0.25	0.24	4.00
1.00	1.000	0.68	0.74	8.82
0.50	0.125	0.55	0.58	5.45
0.50	0.500	0.25	0.21	**16.00**
0.50	1.000	0.71	0.75	5.63
0.25	0.125	0.71	0.72	1.41
0.25	0.500	0.38	0.40	5.26
0.25	1.000	0.73	0.74	1.37
0.05	0.125	0.74	0.73	1.35
0.05	0.500	0.72	0.62	**13.88**
0.05	1.000	0.75	0.73	2.66

A tabela (2) mostra alguns valores estimados do coeficiente de arrasto correspondentes a valores da razão de diâmetros -G- e a separação -H-. Como pode ser observado os resultados podem ser considerados bons. Verifica-se que alguns valores estimados (em negrito na tabela) apresentam uma discrepância grande quando comparados com os valores reais. Estes casos discrepantes ocorrem quando a razão de diâmetros -H- situa-se nas vizinhanças de 0.50; aparentemente o coeficiente de arrasto sofre uma queda, cuja explicação física não pudemos identificar. Deve-se observar, no entanto, que embora o erro percentual seja grande, o erro absoluto é aceitável.

Com um pouco mais de experiência pode-se reformular ou modificar uma das regras na matriz relacional para amenizar ou diminuir o erro cometido. Neste particular, é interessante notar que, eventualmente, o GA poderá amenizar os erros nesta faixa, mesmo que as

atuais regras da matriz relacional sejam mantidas; aliás, este é um fato que se espera com a utilização do algoritimo. No entanto, tendo constatado a ocorrência do fenômeno, o mais indicado seria entender o fenômeno físico e interpretá-lo modificando uma ou várias regras da matriz.

REFERÊNCIAS

BLEVINS,R.D (1984) "Applied Fluid Dynamics Handbook" - Van Nostrand Reinhold Company.

FORREST,S. (1993). "Genetic Algorithms:principles of natural selection applied to computation" - Science, vol 261.

GOLDBERG,D. (1989) "Genetic Algorithms" - Addison-Wesley, NY.

LEE,C.C. (1990) "Fuzzy Logic in Control Systems: Fuzzy Logic Controller - Part I and II"-IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics - vol 20, n.2.

ROSS,T.J. (1995) "Fuzzy Logic with Engineering Applications" - McGraw Hill

ZADEH,L. (1965) "Fuzzy Sets" - Inform. Contr. vol 8.

SUMMARY

The calculation of the aerodynamic loads acting on a bluff body with a complex geometry is very difficult and time consuming. In this paper fuzzy logic and fuzzy sets theory are used to estimate, in a very effective way, the drag coefficient of a bluff body. These tools are, generally, used in control problems, in which a feedback process is present. In our "static" problem, the feedback is not available and genetic algorithms are used to provide a guidance, necessary to improve the estimative of the drag coefficient.

SHOCK TUBE PROBLEM WITH HIGH-TEMPERATURE EFFECTS IN EQUILIBRIUM AIR

Jorge Koreeda
INPE/DMC, Av dos Astronautas 1758, SJ Campos - SP 12201-970 Brazil
Shigeki Harada
Dep of Aerospace Eng, Wichita State University, Kansas 67260-0044, USA
Hiroki Honma
Dep of Mechanical Eng, Chiba University, 1-33 Yayoi-cho, Chiba 263, Japan

SUMMARY

An exact solution of the shock tube problem for high-temperature equilibrium air is presented. Air properties at high temperature are calculated using a method of equilibrium statistical mechanics. In the expansion region, the Riemann invariants are written in a discrete form by using the Simpson integration method. Shock and expansion equations are matched in a system of nonlinear algebraic equations, in which primary variables are reduced to two thermodynamic parameters (pressure and temperature); this system is solved by the Newton-Raphson method. The shock tube problem is solved for air-air case, as an illustration to the expansion tube application.

INTRODUCTION

The solution of the Riemann problem is an essential part of many modern numerical methods. Among them, we can cite the random choice method RCM (Glimm, 1965; Chorin and Marsden, 1990), MUSCL, TVD, etc. (for an overview, refer to Yee, 1987). Most of these methods make use of an approximate Riemann solver. To assess the precision of a new method, frequently it is applied to solve a problem of known solution, like the shock tube problem, which is a particular case of the Riemann problem. When high-temperature effects, i. e., dissociation, ionization, vibrational relaxation, thermal radiation etc. are included, an exact solution may not be easily found. An exact Riemann solver taking into account such effects is useful as a kernel of several numerical methods. Furthermore there is another important reason for studying a Riemann problem including high-temperature effects. Recently, the world-wide interest in generating high-enthalpy flows is increasing, due to aerospace projects related to spaceplanes, AOTV's, space shuttles etc. A "high-temperature" Riemann solver can be a valuable tool in the development of shock tubes, expansion tubes, shock tunnels and similar apparatus that can produce high-enthalpy flows at laboratory level.

For ideal gases the exact solution of Riemann problem is well known. Approximate solutions for non-ideal gases or gases with complex equations of state have been investigated by many authors like Colella and Glaz (1985), Dukowicz (1985), Wada, Ogawa and Ishiguro (1989), and Pike (1993). As previously discussed, the inclusion of high-temperature effects introduces considerable difficulties. Esser and Grönig (1987) presented an exact solution of one-dimensional Riemann problem with equilibrium high-temperature effects in air. They determined the states in regions (2) and (3) of Fig. 1, by intersecting the shock and expansion curves in the pressure-velocity-plane using a secant iteration method. The shock curves were determined from the Rankine-Hugoniot conditions, and the expansion curves from the constancy of Riemann invariants.

In this paper, the shock and expansion regions are simultaneously solved using the Newton-Raphson method. The unknown variables are reduced to a set of thermodynamic parameters. The thermodynamic properties of high-temperature equilibrium air are evaluated using the computational code Thermo, developed by Koreeda and Hinckel (1991). This code handles temperatures from 273 K to 15000 K and pressures from 0.0001 atm to 100 atm. The shock tube problem is solved for air-air case, which illustrates the potential use of the present work to analyze an expansion tube.

AIR MODELLING

At room temperature, air was assumed to consist of $x^0_{N_2} = 78.084\%$ of nitrogen, $x^0_{O_2} = 20.948\%$ of oxygen and $x^0_{Ar} = 0.968\%$ of argon. Molar fractions of nitrogen and oxygen were taken from the U. S. Standard Atmosphere (National Oceanic and Atmospheric Administration, 1976). All molar fractions from minor species were summed up and included in the molar fraction of argon. This model holds in the region up to 86 km of altitude, which is especially important because it is there that occurs most of the reentry deceleration, and also includes the shuttle and rocket paths and the flight corridors of air-breathing hypersonic vehicles.

In the present model, dissociation and ionization processes are taken into account at high temperature, and 13 chemical species are considered: N_2, O_2, NO, N, O, Ar, N_2^+, O_2^+, NO^+, N^+, O^+, Ar^+ and free electrons e^-. Chemical and thermodynamic equilibria are assumed. Chemical reactions in consideration, basic equations for chemical equilibrium and thermodynamic functions are based on Koreeda and Hinckel's paper (1991). Further details can be found in Koreeda's work (1990), Koreeda and Honma's paper (1996).

SHOCK TUBE PROBLEM

The shock tube problem is a special case of the Riemann problem (see for example, Chorin and Marsden, 1990). The Riemann problem concerns the time evolution of waves, given an initial discontinuous distribution of pressure, temperature, density and velocity. One possible case can be visualized in Fig. 1. From right to left there are five regions: undisturbed region (1), region (2) between shock wave and contact surface, region (3) between contact surface and expansion tail, expansion fan (5), and undisturbed region (4). Other combinations of shock wave, contact surface and expansion wave are possible, but in the present paper, only the configuration shown in Fig. is discussed. In this section, the objective is to build the basic algorithm to solve regions (2), (3) and (5), given known conditions in (1) and (4). Viscosity is not taken into account. Only the one-dimensional case is considered, and there are no variations in cross sec-

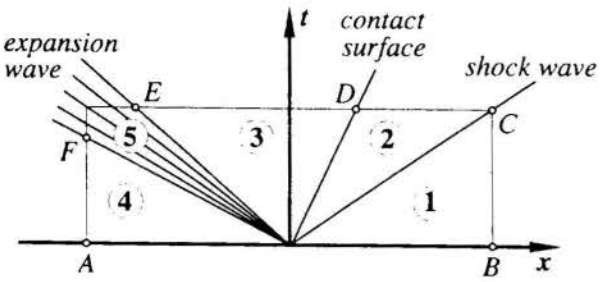


Figure 1 - Space-time diagram for the Riemann problem

tional area. The equilibrium (one-temperature) gas model is assumed.

To solve the Riemann problem, let us start with the shock wave. Considering a frame of reference fixed in the shock and a steady shock velocity u_s, the basic theory of a stationary shock wave can be applied. If we define the velocity variation Δu,

$$\Delta u = \frac{(u_s - u_1) - (u_s - u_2)}{(u_s - u_1)} = \frac{u_2 - u_1}{u_s - u_1} \quad , \tag{1}$$

the conservation of mass is expressed as

$$\Delta u = 1 - \rho_1/\rho_2 \quad , \tag{2}$$

where subscripts refer to regions (1) and (2). The balance equation of momentum gives

$$\frac{p_2}{p_1} = 1 + \frac{\rho_1 (u_s - u_1)^2}{p_1} \Delta u \tag{3}$$

and from the conservation of energy we have

$$\frac{h_2}{h_1} = 1 + \frac{(u_s - u_1)^2}{2h_1} \Delta u (2 - \Delta u) \tag{4}$$

Density and enthalpy in region (2), i. e., ρ_2 and h_2, are functions of pressure p_2 and temperature T_2. Thermo code is used to calculate density ρ_2 and enthalpy h_2 as done by Koreeda and Hinckel (1991).

In the expansion region (5) we have

$$u_3 = u_4 \mp \int_{\text{head}}^{\text{tail}} \frac{dp}{\rho(p,T) a(p,T)} \tag{5}$$

and

$$s(p,T) = s_{\text{head}} \tag{6}$$

where Eq. (5) comes from the integration of Riemann invariants and Eq. (6) comes from the entropy constancy in the expansion fan. In Eq. (5), minus signal before the integral holds for a right-facing wave and plus signal for a left-facing wave. Density, speed of sound and entropy appearing in these equations are calculated by using Thermo. The integral in Eq. (5) is numerically calculated by the Simpson method.

The shock relations, Eqs. (1) to (4), are coupled to the expansion relations, Eqs. (5) and (6), by considering that, across the contact surface, velocity and pressure remain constant, i. e., $u_2 = u_3$ and $p_2 = p_3$. Hence, the coupled shock-expansion relations, after some rearrangements, can be written as

$$f_1(p_2, T_2, T_5^{(i)}) = 1 + \frac{\rho_1}{p_1 \Delta u(p_2, T_2)} (u_2 - u_1)^2 - \frac{p_2}{p_1} = 0 \tag{7}$$

$$f_2(p_2, T_2, T_5^{(i)}) = 1 + \frac{[2 - \Delta u(p_2, T_2)]}{2h_1 \Delta u(p_2, T_2)} (u_2 - u_1)^2 - \frac{h_2(p_2, T_2)}{h_1} = 0 \tag{8}$$

$$f_3(p_2, T_2, T_5^{(i)}) = s_3(p_2, T_3) - s_4 = 0 \tag{9}$$

$$f_{i+3}(p_2, T_2, T_5^{(i)}) = s_5\left(p_5^{(i)}, T_5^{(i)}\right) - s_4 = 0, 1 \le i \le 2N - 1 \tag{10}$$

$$\Delta u(p_2, T_2) = 1 - \rho_1/\rho_2(p_2, T_2) \tag{11}$$

$$u_2 = u_4 \pm \frac{\Delta p}{3} \left\{ \frac{1}{\rho_4} + \frac{4}{\rho_5^{(N)} a_5^{(N)}} + \frac{1}{\rho_3 a_3} + \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{4}{\rho_5^{(2i-1)} a_5^{(2i-1)}} + \frac{2}{\rho_5^{(2i)} a_5^{(2i)}} \right] \right\} \tag{12}$$

$$\rho_5^{(i)} = \rho\left(p_5^{(i)}, T_5^{(i)}\right), \quad 1 \le i \le 2N - 1 \tag{13}$$

$$a_5^{(i)} = a\left(p_5^{(i)}, T_5^{(i)}\right), \quad 1 \le i \le 2N - 1 \tag{14}$$

$$p_5^{(i)} = p_4 + i\Delta p, \quad 1 \le i \le 2N - 1 \tag{15}$$

$$\Delta p = \frac{p_3 - p_4}{2N} \tag{16}$$

Equations (7) and (8) come from Eqs. (3) and (4), respectively. Equation (10) comes from (6). Equation (11) is a repetition of Eq. (1), for completeness. Equation (12) comes from the application of Simpson method to Eq. (5). Density $\rho_5^{(i)}$ and speed of sound $a_5^{(i)}$ are calculated using the expressions shown in . Finally, the pressure inside the expansion fan is given by Eqs. (15) and (16). The number of computational nodes for numerical integration in the expansion fan is given by N. In Eqs. (7) to (16), the superscripts (i) mean positions inside the expansion fan.

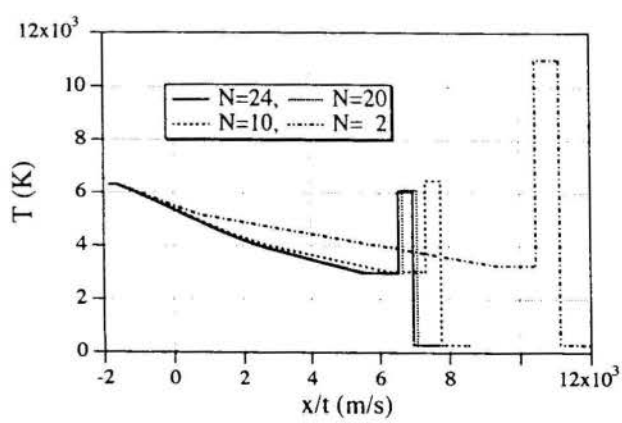


Figure 2 - Effect of the number of divisions N used in the expansion fan calculation. Vertical axis is temperature and horizontal one is position/time. $p_1 = 13.3$ Pa, $T_1 = 293$ K, $p_4 = 1.842$ MPa, $T_4 = 6303$ K

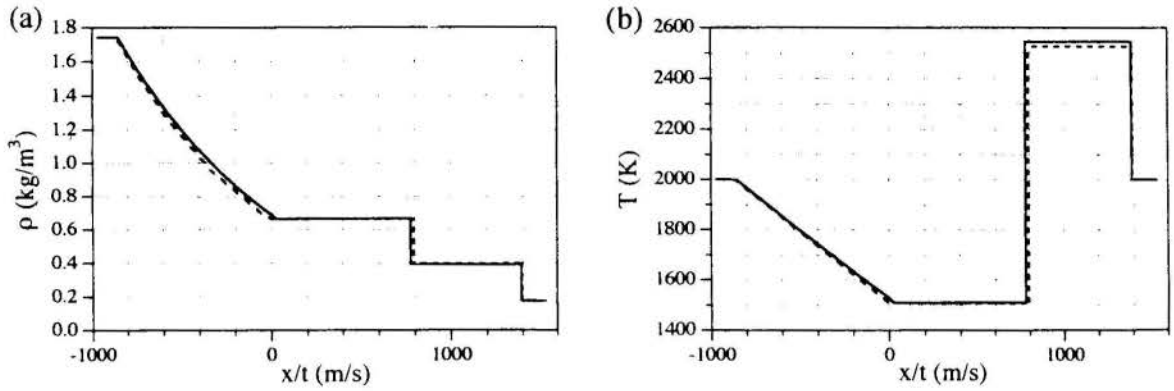


Figure 3 - Comparison between the present calculation (full line) and the Esser-Grönig's results (dashed line). $p_1 = 10^5$ Pa, $p_4 = 10p_1$ and $T_1 = T_4 = 2000$ K.

Equations (7) to (10) constitute an algebraic nonlinear system of $2(N+1)$ equations and $2(N+1)$ variables (p_2, T_2, T_3, $T_5^{(i)}$). Equations (11) to (16) are used as auxiliary equations to this system. The basic unknowns are pressure and temperature, the other parameters being derived from them. The Newton-Raphson method was used to solve the system of equations. The influence of the number of points N for integration in the expansion region is shown in Fig. 2.

Although increasing N gives more accurate results, this implies in a penalty in processing time. All the results shown in this Chapter are for $N = 24$.

If the velocities in regions (1) and (4) are equal to zero, i. e., $u_1 = u_4 = 0$, then, the Riemann problem is called shock tube problem. Figure 3 shows a comparison of the present method for solving the shock tube problem with Esser and Grönig's one (1987). Discrepancies can be attributed to the different high-temperature air models.

EXPANSION TUBE: A SIMPLE ILLUSTRATION

Initial Considerations. A possible application of the algorithm presented in the last section is the simulation of an expansion tube. Expansion tubes are not a new concept, but recently they have gained revitalized efforts mainly due to the necessity to generate superorbital velocities, which appear in reentry flows (Neely and Morgan, 1993). At Chiba University, preliminary experiments have been carried out in a free piston double diaphragm shock tube which is used as an expansion tube. Numerical simulation was also conducted and compared to experimental results (Mitsuda et al, 1994). In Mitsuda et al.'s paper, high-temperature effects were not considered. In the present work equilibrium high-temperature effects are taken into account. The present application does not intend to be a specific simulation of an expansion tube, but solely an illustration of herein developed methods to solve the Riemann problem. In addition, the results could give us an idea of the extent of high-temperature effects.

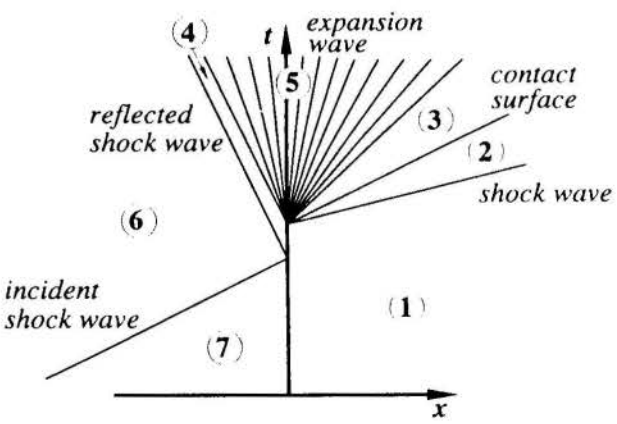


Figure 4 - [illegible]ime diagram for the expansion tube application

A selected portion of the space-time (x-t) diagram for an expansion tube is shown in Fig. 4. Let us suppose a diaphragm initially separating states (1) and (7). These regions are filled with still air, which implies $u_1 = u_7 = 0$. The test conditions are attained in region (3). An incident shock wave then comes from a suddenly ruptured diaphragm or other process. (How this incident shock wave is generated is not relevant for the purposes of the present application.) The incident shock will be reflected in the diaphragm separating (1) and (7), and the region behind the reflected shock is designated by (4). For a given incident Mach number $M_{s(i)}$ equilibrium conditions behind the incident shock, region (6), can be calculated as described by Koreeda and Hinckel (1991). These conditions can then be used to calculate the parameters in (4), by taking care of velocity transformations and then proceeding as in region (6). For completeness, the flow equations to be solved are described in the following subsections.

Incident Shock. By putting the system of coordinates fixed on the incident shock, the relative velocity in region (7) is simply equal to the incident shock velocity, i.e. $u_7' = u_i$, remembering that $u_7 = 0$. Then, balance equations of momentum and energy can be written respectively as

$$g_1^{\text{incident}}(p_6, T_6) = 1 + \frac{\rho_7 u_7'^2}{p_7}\Delta u_6(p_6, T_6) - \frac{p_6}{p_7} = 0 \quad (17)$$

$$g_2^{\text{incident}}(p_6, T_6) = 1 + \frac{u_7'^2}{2h_7}\Delta u_6(p_6, T_6)[2 - \Delta u_6(p_6, T_6)] - \frac{h_6(p_6, h_6)}{h_7} = 0 \quad (18)$$

where Δu_6 comes from conservation of mass,

$$\Delta u_6(p_6, T_6) = u_6/u_i = 1 - \frac{\rho_7}{\rho_6(p_6, T_6)} \quad . \tag{19}$$

The system of equations composed by Eqs. (17) and (18) are solved for p_6 and T_6, by using the Newton-Raphson method.

Reflected Shock. By placing the system of coordinates on the reflected shock, the relative velocity is $u_6' = u_r + u_6$, where u_r is the reflected shock velocity and u_6 is the shock velocity in region (6), which comes from Eq. (19), and both u_r and u_6 are taken relative to the expansion tube. From conservation of mass, the reflected shock velocity can be written as

$$u_r = u_6 \left(\frac{1}{\Delta u_4} - 1 \right) \tag{20}$$

where Δu_4 is given by

$$\Delta u_4(p_4, T_4) = 1 - \frac{\rho_6}{\rho_4(p_4, T_4)} \tag{21}$$

From Eq. (20), the relative velocity in region (6) is

$$u_6' = \frac{u_6}{\Delta u_4} \tag{22}$$

Then, state (4) can be calculated by using again balance equations of momentum and energy, respectively,

$$g_1^{\text{reflected}}(p_4, T_4) = 1 + \frac{\rho_6 u_6'^2}{p_6} \Delta u(p_4, T_4) - \frac{p_4}{p_6} = 0 \tag{23}$$

$$g_2^{\text{reflected}}(p_4, T_4) = 1 + \frac{u_6'^2}{2h_6} \Delta u_4(p_4, T_4)[2 - \Delta u_4(p_4, T_4)] - \frac{h_4(p_4, h_4)}{h_6} = 0 \quad , \tag{24}$$

and Δu_4 comes from conservation of mass

$$\Delta u_4(p_4, T_4) = 1 - \frac{\rho_6}{\rho_4(p_4, T_4)} \quad . \tag{25}$$

As before, Eqs. (23) and (24) are solved by the Newton-Raphson method. With p_4 and T_4 so obtained, the shock tube problem can be solved by setting $u_1 = u_4 = 0$ and by solving Eqs. (7) to (10).

RESULTS AND DISCUSSION

Two cases were analyzed, one with $p_1 = 13.3$ Pa and another with $p_1 = 133$ Pa, and in both cases $p_7/p_1 = 100$ and $T_1 = T_4 = 293$ K. Table 1 summarizes the results for regions (6) and (4).

In Fig. 5 the present simulation was compared to the case where a calorically perfect gas (CPG) model is assumed. Behind the reflected shock, region (4), the temperature of CPG is higher than the temperature of equilibrium gas. As expected, there is a great difference in the temperature between the two gas models. There is also an appreciable difference in density behavior. The advancing shock velocity of equilibrium gas is less than that of CPG, but the contact

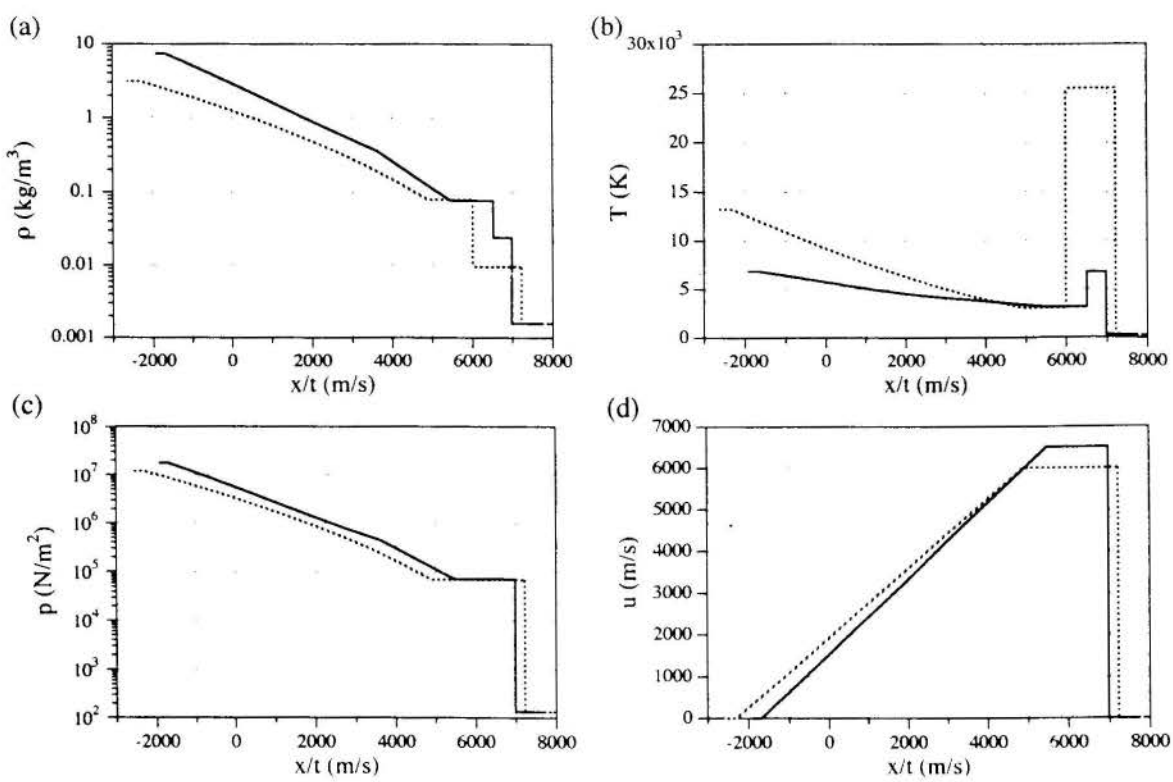


Figure 5 - Comparison between the equilibrium gas model (full line) and the calorically perfect gas model (dashed line). (a) Density, (b) temperature, (c) pressure and (d) velocity. Driver-driven: air-air, $M_{s(i)} = 10$, $p_1 = 133$ Pa $p_7 = 100p_1$, $T_1 = T_7 = 293$ K

Table 1 - Conditions before and after shock reflection, for the same conditions as in Fig. 5:

	$p_1 = 13.3$ Pa, $p_7 = 1.33$ kPa	$p_1 = 133$ Pa, $p_7 = 13.3$ kPa
u_i (m/s)	3431	3431
u_r (m/s)	660.6	655.2
u_6 (m/s)	3062	3036
p_6 (MPa)	0.1674	1.661
T_6 (K)	3652	3973
p_4 (MPa)	1.842	17.26
T_4 (K)	6303	6876

surface velocity is faster. As a result, the region between the shock and the contact surface is narrower in equilibrium gas. But the region between expansion tail and contact surface, i. e. region (3), has approximately the same length per unit time. This region corresponds to the test gas of expansion tube, and it is desirable to have testing times as large as possible. In region (3), pressure, temperature and density are almost the same in both equilibrium gas and CPG.

The lower temperature values behind the shock, region (2), in case of equilibrium gas, can be explained by the fact that dissociation, mainly of oxygen and in a smaller extent nitrogen, consume part of the total flow energy to occur. The equilibrium chemical composition behind the shock is shown in Table 2, for the same conditions as in Fig. 5. From head to tail of the expansion fan, there is chemical recombination, mainly of atomic oxygen in molecules O_2, as can be seen in Fig. 6. The curves of NO^+ and free electrons e^- are practically coincident, showing the main ionized species is NO. The decrease of e^- in the direction of expansion tail are due to the recombination of ionized species in neutral ones. In Fig. 7, results are shown for different initial pressures. There are two cases, where $p_1 = 13.3$ Pa or $p_1 = 133$ Pa, and in both cases $p_7 = 100p_1$. Mach number of the incident shock in

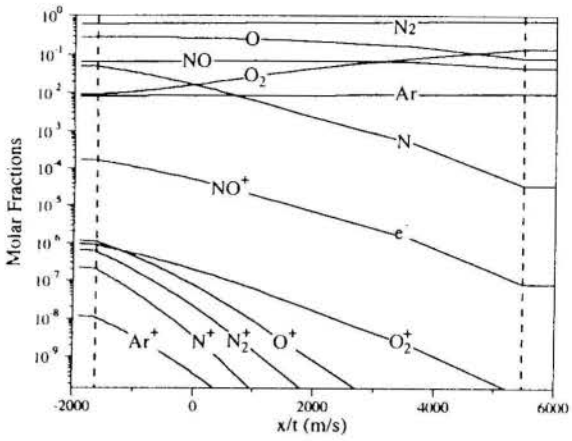


Figure 6 - Equilibrium chemical composition in the expansion fan, for the same conditions as in Fig. 5. Vertical dashed lines at left and right correspond, respectively, to head and tail of the expansion fan

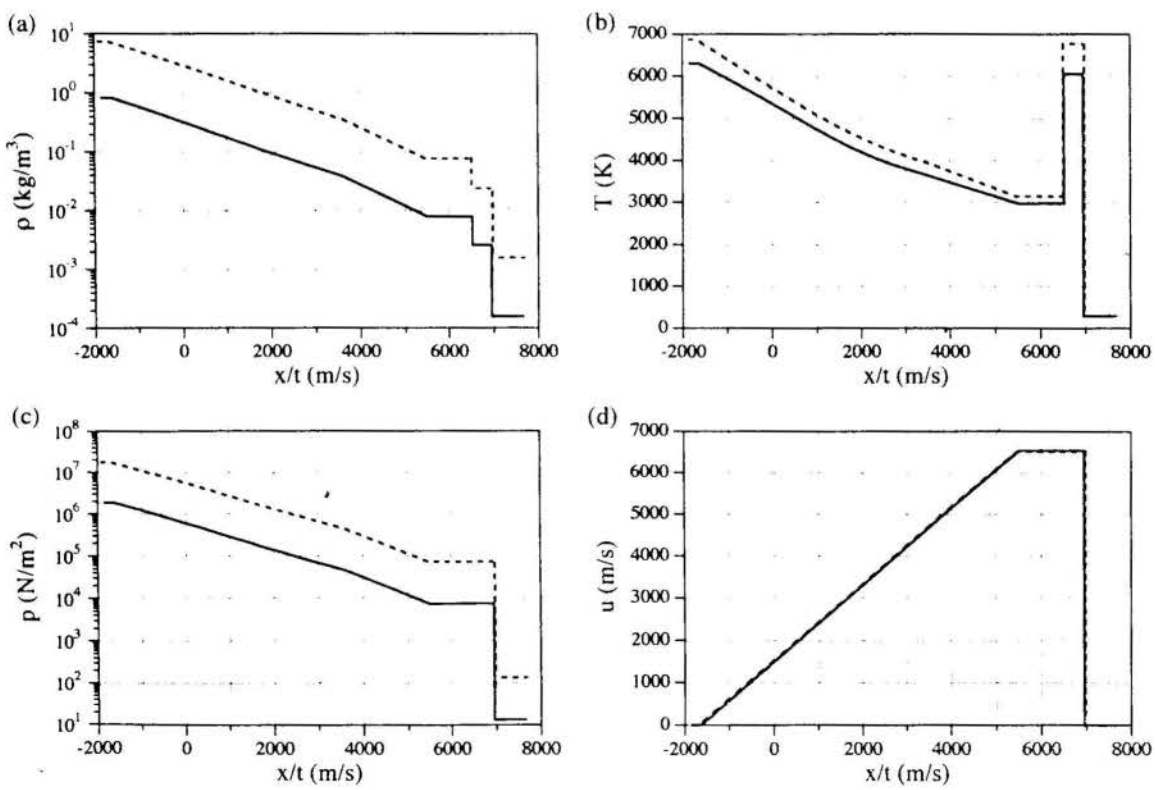


Figure 7 - Influence of initial pressure $p_1 = 13.3$ Pa (full line) and $p_1 = 133$ Pa (dashed line). (a) Density, (b) temperature (c) pressure and (d) velocity. Driver-driven: air-air, $M_{s(i)} = 10$, $p_7 = 100p_1$, $T_1 = T_7 = 293$ K

Table 2 - Equilibrium chemical composition behind the shock wave, region (2), for the same conditions as in Fig. 5:

Species	Molar fractions
N	4.53712×10^{-1}
O	2.6486×10^{-1}
Ar	6.20842×10^{-3}
N_2	2.71261×10^{-1}
O_2	3.98645×10^{-5}
NO	2.80545×10^{-3}
N^+	9.32452×10^{-5}
O^+	5.41792×10^{-5}
Ar^+	3.96392×10^{-7}
N_2^+	1.29631×10^{-5}
O_2^+	2.07133×10^{-7}
NO^+	3.95283×10^{-4}
e^-	5.56274×10^{-4}

region (7) is $M_{s(t)} = 10$ for both initial pressure sets. For increasing p_1 and p_7, there is a vertical shift of the pressure and the density curves, but the velocity curve remains almost unchanged. Although a shift is also observed in the temperature curve, this occurs in such a way that the temperature in region (3) is roughly the same in both cases (3000 K). Therefore, the temperature of test gas is not heavily dependent on initial pressures p_1 and p_7, if the ratio p_7/p_1 is fixed.

FINAL REMARKS

An "exact" solution of the shock tube problem for high-temperature equilibrium air was developed. The main difference between the present algorithm and the Esser and Grönig's one is that shock and expansion regions are simultaneously solved by means of Newton-Raphson method. In addition, the primary variables of the system of equations are reduced to the thermodynamic parameters pressure and temperature. Small discrepancies were observed when comparing the two methods, but this could be attributed to the different high-temperature air modelling.

In the present work, the "classical" Riemann problem was solved, that is, initial values of pressure, density, temperature and velocity (equal to zero, in the shock tube problem) were considered as uniform distributions in regions (1) and (4). A more accurate procedure should consider the so-called "generalized" Riemann problem (GRP) (for a review of the GRP scheme, see for example, Falcovitz, 1989). Such procedure was applied by Ben-Artzi (1989) to solve the one-dimensional Riemann problem, when vibrational relaxation is present. The results obtained here for equilibrium air can be used as a starting point to solve a much more complex case of nonequilibrium air.

The "exact" solution of the Riemann problem, either "classical" or generalized, can be used to compare with approximate solutions. And even approximate Riemann solvers can have benefits in accuracy by the use of thermodynamic functions as calculated here, instead of the use of interpolated ones. In particular, functions depending on the derivatives of chemical composition are benefited, especially at higher temperatures when chemical reactions predominate.

Future developments could include different cross sections areas in regions (1) and (7), which should allow more realistic simulations. Other possible applications could be the analysis of possible interactions among shock, contact surface and expansion wave. Then, theoretical modelling including high-temperature effects of tailoring conditions and more specific shock/expansion tube analysis could be performed.

REFERENCES

Ben-Artzi, M., 1989, "The Generalized Riemann Problem for Reactive Flows," *J. Comp. Phys.*, Vol. 81, pp. 70-101.

Chorin, A. J. and Marsden, J. E., 1990, *A Mathematical Introduction to Fluid Dynamics*, Springer, New York.

Colella, P. and Glaz H. M., 1985, "Efficient Solution Algorithms for the Riemann Problem for Real Gases," *J. Comp. Phys.*, Vol. 59, pp. 264-289.

Dukowicz, J. K., 1985, "A General, Non-Iterative Riemann Solver for Godunov's Method," J. Comp. Phys. Vol. 61, pp. 119-137.

Esser, B. and Grönig, H., 1987, "Equilibrium Shock Tube Flow of Real Gases," *Proc. 16th Intl. Symp. on Shock Tubes and Waves*, Grönig H (ed.), Aachen, Germany, pp. 663-669

Falcovitz, J., 1989, "Riemann Schemes for Compressible Fluid Flow," *Shock Wave Phenomena: Experimental and Numerical Studies, CISM*, Udine.

Glimm, J., 1965, "Solutions in the Large for Nonlinear Hyperbolic Systems of Equations," *Comm. Pure Appl. Math.*, Vol. 18, pp. 697-715.

Koreeda, J., 1990, "Thermodynamic Properties of Air in Equilibrium at High Enthalpies and Their Utilization in Flows through Normal and Oblique Shock Waves and Quasi-One-Dimensional Nozzles," Master Thesis, Technological Institute of Aeronautics – ITA, São José dos Campos, Brazil. (In Portuguese)

Koreeda, J. and Hinckel J. N., 1991, "Inviscid Flows Through Normal and Oblique Shock Waves in Equilibrium Air, Including Thermodynamic Properties Evaluated from Scratch," *Proc. Intl. Workshop on Strong Shock Waves*, H. Honma and K. Maeno (eds.), Chiba, Japan, pp. 189-205.

Koreeda, J. and Honma, H., 1996, "An Exact Riemann Solver for High-Temperature Equilibrium Air," *Trans. Japan Soc. Aeronautical and Space Sciences*, Vol. 38, No. 122, pp. 297-310.

Mitsuda, M., Oda, T., Kurosaka, T., Wakuri, S., Arai, T., Honma, H., and Yanagisawa, H., 1994, "Numerical and Experimental Study for Free Piston Expansion Tube," 18th AIAA Aerosp. Ground Testing Conf., Colorado Springs, *AIAA Paper 94-2528*

National Oceanic and Atmospheric Administration, 1976, *U. S. Standard Atmosphere*, USAF, NASA, Washington, 1976

Neely, A. J. and Morgan R. G., 1993, "Hypervelocity Aerodynamics in a Superorbital Expansion Tube," *Shock Waves at Marseille I: Hypersonics, Shock Tube and Shock Tunnel Flow, Proc. 19th Intl. Symp. on Shock Waves*, Brun, R. (ed.), Marseille, France, pp. 197-202.

Pike, J., 1993, "Riemann Solvers for Perfect and Near-Perfect Gases," *AIAA Journal*, Vol. 31, N. 10, pp. 1801-1808.

Wada, Y., Ogawa, S., and Ishiguro, T., 1989, "A Generalized Roe's Approximate Riemann Solver for Chemically Reacting Flows," *AIAA Paper 89-0202*.

Yee, H. C., 1987, "Upwind and Symmetric Shock-Capturing Schemes," *NASA TM 89464*.

MODELAGEM AERODINÂMICA DE TURBINAS EÓLICAS DE PASSO VARIÁVEL

Armando Medeiros
Grupo de Energia Eólica, UFPE/CTG/ DEMEC
50.740-530 Recife - PE - Brasil
F. J. Simões, A. M. N. Lima, C. B. Jacobina
UFPB/CCT - Av. Aprígio Veloso, 882 - Campina Grande/PB

SUMÁRIO

Este artigo apresenta um novo procedimento para a modelagem aerodinâmica de turbinas eólicas de eixo horizontal tendo como variáveis o passo e o ângulo de guinada. Da simulação do sistema, operando próximo às condições nominais, verificou-se que a modelagem introduz um erro máximo de 3% em relação aos dados originais.

INTRODUÇÃO

Neste artigo é abordada a modelagem aerodinâmica de turbinas eólicas de grande porte, com eixo horizontal e passo variável. O desempenho aerodinâmico de uma turbina deste tipo depende da faixa de velocidades do vento, pois, de acordo com a figura 1, para $V<V_r$ o passo θ é fixo (θ = 0°). Neste caso, o coeficiente de conjugado do rotor eólico é função apenas da razão de velocidades na ponta da pá, λ. O ângulo de guinada, δ, ("yaw angle") é supostamente nulo, pois, o controle de direção da nacele procura sempre fazer δ=0°. É possível utilizar, também, o ângulo de guinada para regulagem de potência quando $V \geq V_r$. Neste caso, tanto θ como δ influenciam o desempenho aerodinâmico do rotor, além de λ . A figura 1 mostra a faixa de atuação dos controladores do sistema.

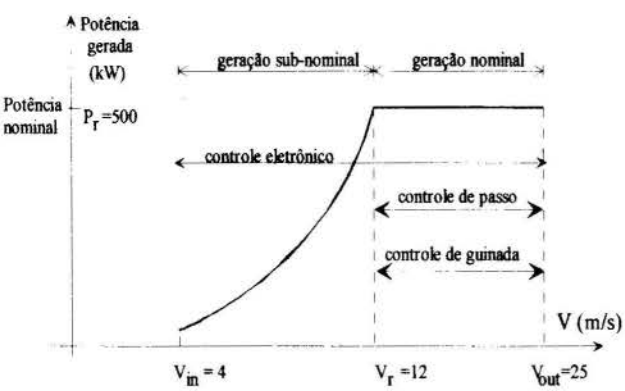


Figura 1 Geração sub-nominal e nominal de uma turbina eólica em fun ção de V

A análise realizada neste artigo considera a condição mais complexa, ou seja, a da modelagem aerodinâmica em operação nominal. O estudo foi realizado tomando por base uma turbina com 40 metros de diâmetro, duas pás e potência nominal de 500 kW. Os dados são fornecidos pelo programa computacional BLADES (Hassan, 1988) a partir do qual se adotou o perfil NACA 4418. Além disso, o peso dos componentes da turbina e o momento de inércia em relação ao eixo horizontal e em relação ao eixo vertical, foram obtidos com base nos dados da turbina dinamarquesa Vestas V39 - 500 kW (Vestas, 1994).

O desempenho aerodinâmico de um rotor eólico, em termos das curvas C_p - λ ou C_q - λ, é calculado considerando a contribuição de cada elemento de pá, geralmente dividida em diversas seções ou estações. Este procedimento, bastante demorado sob o ponto de vista de tempo de computação, resulta em funções não-lineares, específicas para cada valor do passo, tornando-se inadequadas tanto para simulação como para o cálculo dos controladores mecânicos e eletrônicos. Este artigo mostra como o desempenho do rotor pode ser modelado de modo a resultar em uma expressão para o conjugado aerodinâmico C_m em função das variáveis: V, θ , δ e de ω. Deve-se salientar que o controlador ótimo tem a função de regular a potência gerada P_g na faixa de operação nominal onde ω e C_m devem ser mantidos constantes.

Outro ponto relevante deste trabalho é a modelagem do momento fletor na raiz da pá M_n causado pelos esforços distribuidos na pá, normais ao plano de rotação. O procedimento utilizado é idêntico ao anterior.

DEFINIÇÃO DAS VARIÁVEIS AERODINÂMICAS

Arrasto e sustentação. Os esforços de arrasto ΔD ("drag") e de sustentação ΔL ("lift") atuantes em um elemento de pá, de envergadura pequena Δr, devido à ação da velocidade relativa do vento W, são mostrados na figura 2. Estes esforços geram o esforço normal ΔF_n e o esforço tangencial (de torque) ΔF_t.

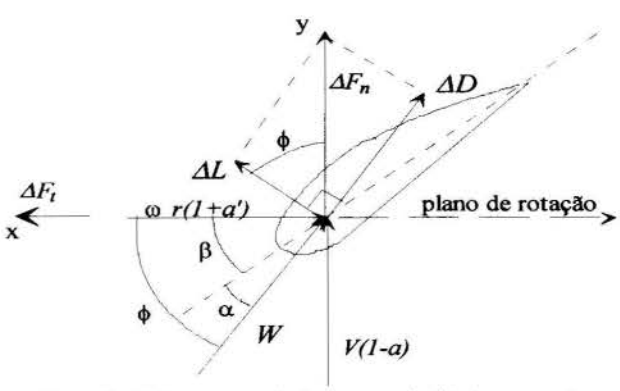


Figura 2 Esforços aerodinâmicos e velocidades na seção transversal do perfil.

Na figura 2 os parâmetros "a" e "a' " são denominados fatores de interferência axial e tangencial , respectivamente. Os ângulos α e β são os ângulos de ataque e de posição da seção, respectivamente. O efeito do passo variável é alterar o ângulo β. Os valores dos esforços, segundo Lysen (1983), são:

$$\Delta D = C_D \tfrac{1}{2} \rho W^2 c \Delta r \qquad (1)$$

$$\Delta L = C_L \tfrac{1}{2} \rho W^2 c \Delta r \qquad (2)$$

$$\Delta F_n = C_y \tfrac{1}{2} \rho W^2 c \Delta r \,,\; C_y = C_L \cos\phi + C_D \operatorname{sen}\phi \qquad (3)$$

$$\Delta F_t = C_x \tfrac{1}{2} \rho W^2 c \Delta r \,,\; C_x = C_L \operatorname{sen}\phi - C_D \cos\phi \qquad (4)$$

onde C_L e C_D são denominados coeficientes de sustentação e de arrasto, respectivamente. Estes parâmetros são determinados através de experimentos em túnel de vento para diversos valores de ângulo de ataque. Abbott e Doenhoff (1959) fornecem tabelas e curvas para diversos perfis aerodinâmicos. Por outro lado, as velocidades na seção transversal da figura 2 estão relacionadas entre si de acordo com o diagrama abaixo.

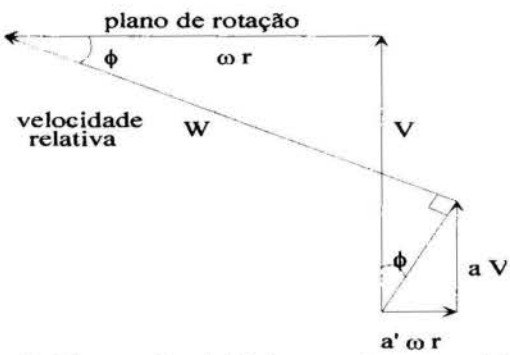


Figura 3 Diagrama de velocidades na seção transversal da pá.

Razão de velocidades na ponta da pá λ.

$$\lambda = \frac{\omega R}{V} \qquad (5)$$

O valor da razão de velocidades de projeto λ_o é especificado de acordo com o tipo de aplicação. Os valores mais comuns são: $\lambda_o = 1$ para bombeamento de água enquanto $6 < \lambda_o < 10$ para geração de eletricidade.

Esforços na raiz da pá. Os momentos fletores na raiz da pá M_t e M_n, devidos aos esforços nos sentidos tangencial e normal ao plano de rotação, respectivamente, são os responsáveis por possíveis falhas mecânicas na pá. Para calcular estes esforços, o programa BLADES divide a pá em diversos elementos e considera os valores médios dos esforços tangencial ΔF_t e normal ΔF_n .(distribuídos ao longo da pá), entre nós consecutivos, como mostra a figura 4.

Os valores de ΔM_t e ΔM_n podem ser obtidos a partir das equações (3) e (4):

$$\Delta M_n = dF_n \, \Delta r \qquad e \qquad \Delta M_t = dF_t \, \Delta r \qquad (6)$$

Os momentos fletores M_t e M_n em cada seção (k) da pá podem, então, ser definidos pelas equações:

$$M_t(k) = \int_0^{x_k} \Delta F_t(x) x \, dx = \sum_{i=k}^{n} \overline{\Delta F_t}(i) \frac{x^2(i)}{2} \qquad (7)$$

$$M_n(k) = \int_0^{x_k} \Delta F_n(x) x \, dx = \sum_{i=k}^{n} \overline{\Delta F_n}(i) \frac{x^2(i)}{2} \qquad (8)$$

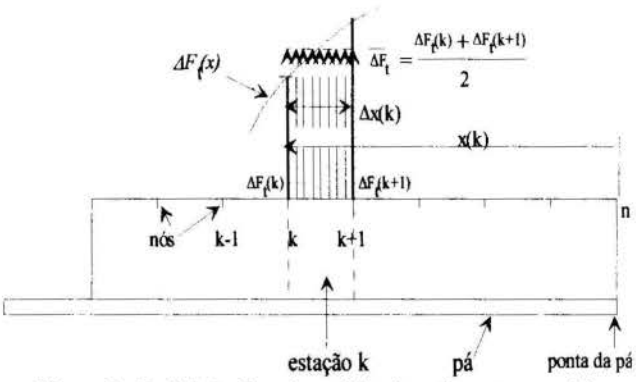


Figura 4 Definição do valor médio do esforço tangencial distribuído na estação k

O valor do momento fletor tangencial ao longo da pá, obtido a partir da equação (7), é mostrado na figura 5a enquanto o valor do momento fletor normal ao longo da pá, obtido a partir da equação (8), é mostrado na figura 5b. Em ambas as figuras, os valores de M_t e de M_n, em função do raio local r, são comparados com os resultados fornecidos diretamente pelo programa BLADES, para o rotor Smith-Putnam (Hassan, 1988). Na raiz da pá, o valor do erro, em ambos os momentos fletores, é da ordem de 3%, o que é bastante aceitável quando considerados as incertezas relativas ao desempenho aerodinâmico do rotor.

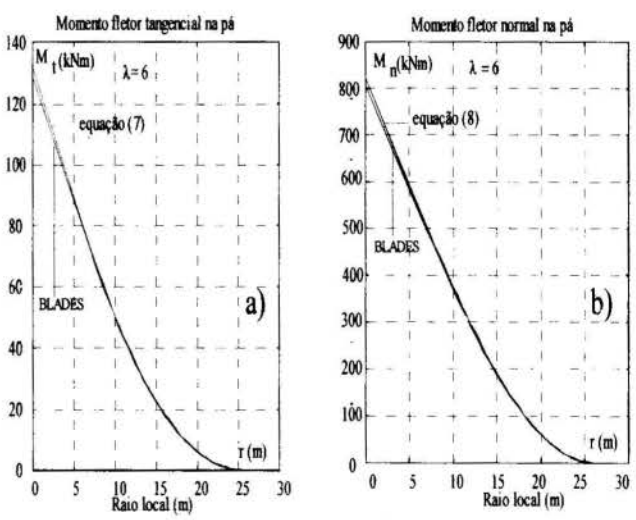


Figura 5 Validação dos momentos fletores tangencial M_t e normal M_n , ao longo da pá

Coeficientes de conjugado C_q e do momento normal C_f (coeficiente de "flapping"). Estes coeficientes são obtidos em função de M_t e de M_n , na raiz da pá, respectivamente, de acordo com as equações (9) e (10). Estes resultados, denominados "valores originais", são mostrados na figura 6.

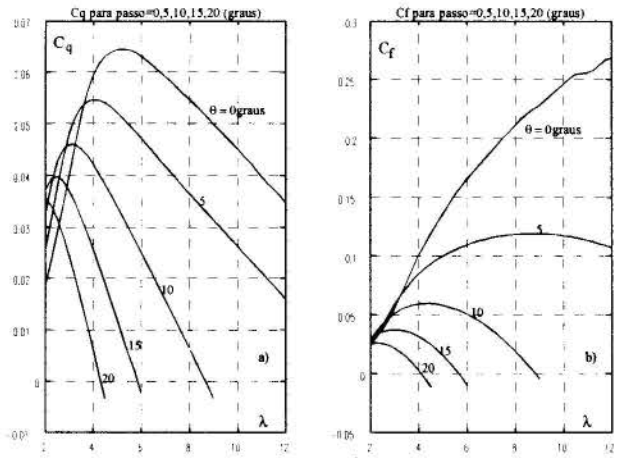


Figura 6 Valores de a)C_q e b)C_f em função de λ, para θ=0, 5, 10, 15 e 20 graus.

$$C_q = \frac{torque\ no\ eixo}{\frac{1}{2}\rho A R V^2} = \frac{M_t B}{\frac{1}{2}\rho A R V^2} \quad (9)$$

$$C_f = \frac{Momento\ de\ flapping}{\frac{1}{2}\rho A R V^2} = \frac{M_n}{\frac{1}{2}\rho A R V^2} \quad (10)$$

onde:

- A - área varrida pelas pás ($A = \pi R^2$)
- ρ - massa específica do ar (1,22 kg/m^3)
- V - velocidade não perturbada do vento
- M_t - momento fletor tangencial na raiz da pá (devido a F_t)
- M_n - momento fletor normal na raiz da pá (devido a F_n)
- B - número de pás (B=2)

MODELAGEM DO CONJUGADO AERODINÂMICO

Expressão do conjugado aerodinâmico C_m para δ = 0. Lysen (1983) define C_m pela expressão:

$$C_m = \frac{1}{2}\rho A R V^2 C_q = K V^2 C_q \quad (11)$$

onde, admitindo-se a variação do passo θ, tem-se:

$$C_q = f(\lambda,\theta) \Rightarrow C_m = g(\lambda,\theta,V) \ \ ou \ \ C_m = g_1(V,\theta,\omega)$$

A partir da figura 6a, pode-se observar o comportamento linear de C_q para uma determinada faixa de valores de λ. Para fins de controle, é conveniente linearizar-se C_q em torno do ponto de operação em regime permanente (Marechal, 1987). Isto é:

$$C_q = a\lambda + b \quad (12)$$

onde: $a = h_1(\theta)$ e $b = h_2(\theta)$.

Os resultados da linearização de C_q são mostrados na figura 7 onde o passo varia de 0 a 20 graus em intervalos de 2,5 graus. A figura 7 também mostra os pontos de operação em regime permanente.

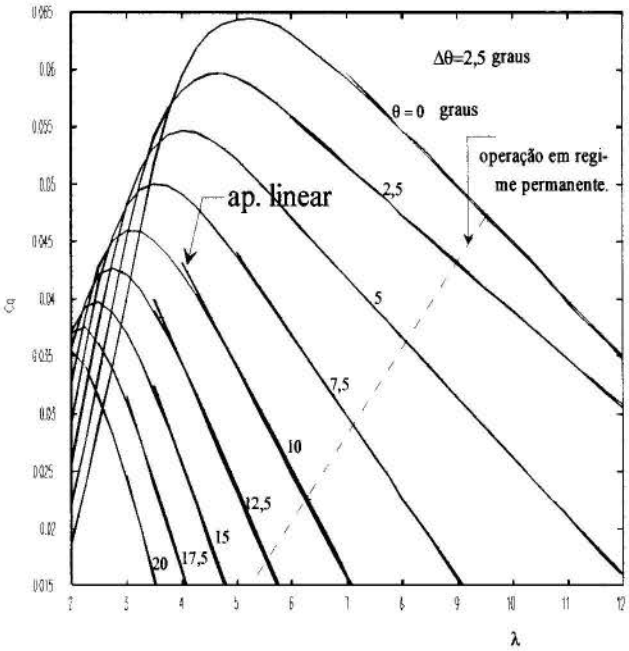


Figura 7 Linearização do coeficiente de torque

Adicionalmente, os coeficientes "a" e "b" podem ser representados por polinômios em θ de grau n e m, respectivamente.

$$a = A_n \theta^n + A_{n-1}\theta^{n-1} + ... + A_0 \quad (13)$$

$$b = B_m \theta^m + B_{m-1}\theta^{m-1} + ... + B_0 \quad (14)$$

É importante ressaltar que o aumento nos valores de n e m reduz o erro na representação. No entanto, aumenta o esforço de computação. A solução ideal deve considerar simultaneamente estes dois fatores. Com base na equação (12), os valores de "a" e "b" são obtidos pelo ajuste da reta à curva original C_q x λ através da Regra dos Mínimos Quadrados (RMQ), para cada valor do passo θ. Os valores de "$a(\theta)$" e "$b(\theta)$", resultantes deste ajuste, são então aproximados pelos polinômios das equações (13) e (14), tendo o passo como variável.

Aplicando a RMQ, pôde-se determinar os coeficientes dos polinômios de "a(θ)" e "b(θ)", dados pelas equações (13) e (14). Como melhor resultado para o grau dos polinômios, encontrou-se: n=4 e m=5. Os erros máximos obtidos são inferiores a 0,5%. A figura 8 mostra estes resultados.

Na equação (11) substituindo-se o valor de C_q dado pela equação (12), onde λ pode ser dado também pela equação (5), obtem-se finalmente:

$$C_m = KV^2 C_q(\theta,\lambda) = KV^2\left[a(\theta)\frac{\omega R}{V} + b(\theta)\right]$$

$$\Rightarrow C_m = KRVa(\theta)\omega + KV^2 b(\theta) \quad (15)$$

A equação (15) é uma representação do conjugado C_m em função das variáveis V,θ,ω . Neste caso, supôs-se δ=0. A representação linear de C_m, usada para fins de controle, pode ser obtida a partir desta equação (Medeiros, 1995).

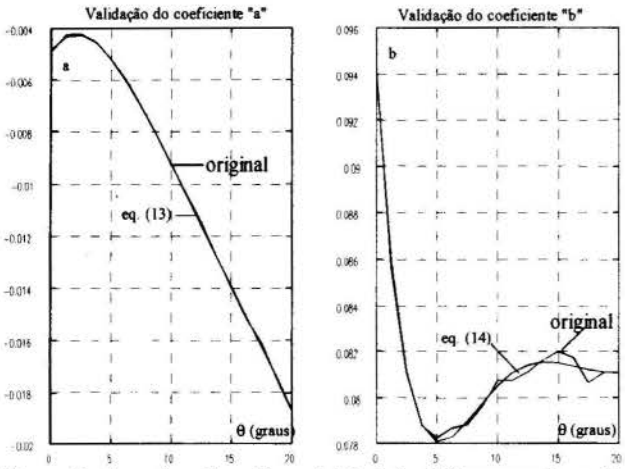


Figura 8 Aproximação polinomial de "a" e "b" para m=4 e n=5, em função de θ.

Expressão do momento fletor M_n para $\delta = 0$. Um procedimento idêntico é assumido para M_n que pode ser obtido da equação (10).

$$M_n = \tfrac{1}{2}\rho A R V^2 C_f(\lambda,\theta) \qquad (16)$$

Por sua vez, o coeficiente de "flapping" C_f, mostrado na figura 6b, pode ser representado por um polinômio de segundo grau em λ, para cada valor de θ. Isto é:

$$C_f(\lambda,\theta) = a(\theta)\lambda^2 + b(\theta)\lambda + c(\theta) \qquad (17)$$

Os coeficientes "*a*", "*b*", "*c*" podem ser ajustados por polinômios em θ, de ordem *m,n,p* respectivamente. Das simulações encontrou-se $m=n=p=4$, como o melhor resultado. Os resultados do ajuste, também obtido pela RMQ, são mostrados na figura 9.

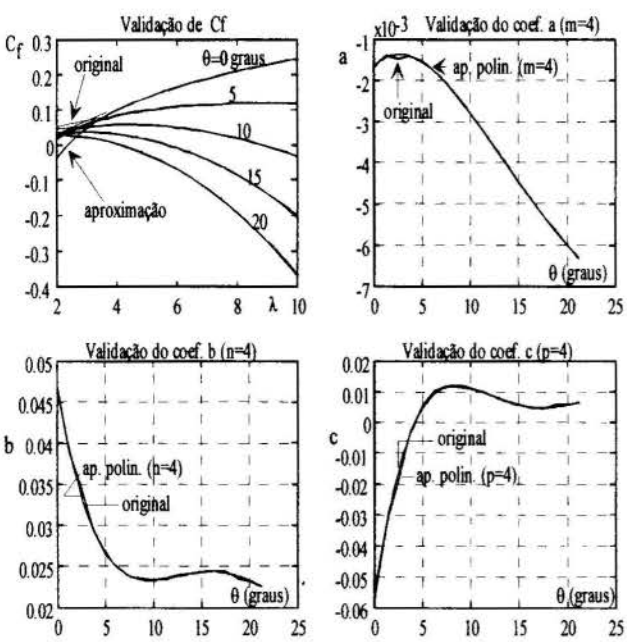


Figura 9 Aproximação polinomial de "a", "b", "c" para m=n=p=4, em função de θ.

Na figura 9, para θ=0° e $\lambda \leq 4$ verifica-se que o ajuste não é adequado. No entanto, quando o SCEE está operando com θ=0°, tem-se que λ se aproxima de 9,5. Tendo-se isto em conta, os erros do ajuste são muito pequenos, sinalizando valores ainda menores que os encontrados no ajuste do C_m. Embora M_n não influencie diretamente a velocidade da máquina, é importante ter-se uma representação de M_n, pois, sendo muito maior que C_m poderá ter maior influência em posssíveis falhas nas pás.

Efeito do ângulo de guinada na expressão do conjugado C_m ($\delta \neq 0$). A potência mecânica no eixo do rotor quando $\delta \neq 0$ segue com boa aproximação a Lei do Cosseno Cúbico (LCC) para $\delta < 30°$, de acordo com Glasgow *et alii* (1981). Tem-se:

$$P_m(\delta) = P_m(\delta = 0)\cos^3(\delta) = P_{m_{\delta=o}}\cos^3(\delta) \qquad (18)$$

Em se tratanto do conjugado aerodinâmico C_m, tem-se dois tipos de variações: com δ e com a posição da pá φ (quando as pás estão na posição horizontal: φ=0°) que varia em ciclos de 180°. Para fins de controle, é necessário determinar-se, no ciclo de 180°, o valor médio de C_m cujo valor passa a ser função apenas de δ, suposto constante no ciclo. Para isso, basta calcular a energia mecânica E_m entregue ao eixo do rotor, durante o ciclo de 180° . Tem-se:

$$E_m = \int_0^{\Delta T} P_m\, dt = \int_0^{\Delta T} P_{m_{\delta=o}} \cos^3\delta\, dt = P_{m_{\delta=o}} \cos^3\delta\, \Delta T \qquad (19)$$

Tem-se também: $$E_m = \int_0^{\pi} C_m\, d\varphi = \int_0^{\Delta t} C_m\, \omega\, dt \qquad (20)$$

Pode-se demonstrar que para uma variação máxima de 30% no valor de referência de C_m (em r.p. e com φ=0°), a variação de ω no ciclo é muito pequena devido à grande inércia do sistema. Esta variação de 30% corresponde à situação mais desfavorável quando $\lambda \cong 4$ (Medeiros, 1995).

Cálculo de Δω. Considerando uma variação do estado do sistema em estudo, em torno da condição de regime permanente, pode-se escrever:

$$I\dot{\omega} = \Delta C_m = p C_{m_{rp}} \quad \Rightarrow \quad \dot{\omega} = \frac{p C_{m_{rp}}}{I}$$

onde $C_{m_{rp}}$ é o conjugado aerodinâmico de regime permanente para φ=0. Considerando dω/dt = cte, durante o ciclo Δφ=π rad, e utilizando-se os dados do sistema, pode-se obter a relação:

$$\omega_f^2 - \omega_o^2 = 2\dot{\omega}\Delta\varphi \Rightarrow \frac{\Delta\omega}{\omega_o} = \frac{\pi\, p C_{m_{rp}}}{I\omega_o^2} = 0{,}063\, p \qquad (21)$$

onde foi assumido que: $(\omega_f + \omega_o) = 2\,\omega_o$. Considerando a variação "p" em C_m de 30% conclui-se a partir da equação (21) que a variação em ω é inferior a 2%. Portanto, a hipótese de que ω=cte no ciclo, é bastante aceitável. Assim, igualando as equações (19) e (20) obtem-se para o valor médio do conjugado aerodinâmico $C_{m\delta}$ no ciclo de 180°:

$$\int_0^{\Delta T} C_m\,dt = \left({P_{m_{\delta=o}}}/{\omega} \right) cos^3\delta\,\Delta T$$
$$C_{m\delta} = \frac{1}{\Delta T}\int_0^{\Delta T} C_m\,dt \Rightarrow C_{m\delta} = C_{m_{\delta=0}}\,cos^3\delta \qquad (22)$$

pois, por definição: $C_{m\delta=0}=(P_{m\delta=0}/\omega)$. Por outro lado, aproximando $\cos^3\delta$ por um polinômio de segundo grau, em δ, através da regra dos RMQ, obtem-se a expressão:

$$\cos^3\delta = b_o + b_1\delta + b_2\delta^2$$
$$= 1{,}0046 - 0{,}1030\delta - 1{,}1193\delta^2 \qquad (23)$$

O termo $\cos^3\delta$ também pode ser aproximado por uma Série de Taylor até o termo de 2° grau, em torno de δ_o=15° , resultando:

$$\cos^3\delta = 1{,}0115 - 0{,}1182\delta - 1{,}1577\delta^2 \qquad (23a)$$

Substituindo-se os termos da equação (22), dados pelas equações (15) e (23), obtem-se a expressão final do conjugado:

$$C_{m\delta} = [KRVa(\theta)\omega + KV^2b(\theta)](b_o + b_1\delta + b_2\delta^2)$$
$$\therefore C_{m\delta} = f(V, \theta, \omega, \delta) \qquad (24)$$

VALIDAÇÃO DO MODELO

Para validar o modelo foi determinado o erro percentual cometido no valor de C_m a partir de seu valor original e do valor dado pela equação (24). O valor original de C_m é obtido a partir da equação (11) utilizando as curvas originais de C_q (figura 6.a), obtidas pela Teoria do Elemento de Pá, em regime permanente. A seguir, este valor deve ser multiplicado pelo valor exato de $\cos^3(\delta)$.

O valor de λ, que define o valor de C_q na equação (11), foi determinado a partir da simulação do sistema em malha aberta com uma variação em V de 5m/s, em 1 segundo, e considerando que o sistema está em regime permanente para t=0. O ângulo de guinada δ é suposto variar linearmente com t de 0° a 30°.

As curvas originais de C_q foram obtidas a partir de 0° até 20°, com incremento fixo de 1,25°, resultando em 17 curvas com os seguintes valores:

θ = 0°; 1.25°; 2.5°; 3.75°; 5°;....; 10°;....; 15°;...; 20°

O erro percentual foi calculado para todas as curvas. Os resultados foram agrupados em 4 conjuntos para melhor visualização, da seguinte forma:

- grupo 1: θ = 0°; 1.25° (duas curvas);
- grupo 2: θ = 2.5°; 3.75°;.....; 7.5° (cinco curvas);
- grupo 3: θ = 8.75°; 10°;.....; 13.75° (cinco curvas);
- grupo 4: θ = 15°; 16.25°;.....; 20° (cinco curvas);

Grupo 1. Estas duas curvas apresentam um comportamento distinto das demais sendo, portanto, analisadas em separado. Isto pode ser visualizado na figura 8 que mostra um comportamento singular dos parâmetros "a" e "b", para valores pequenos de θ.

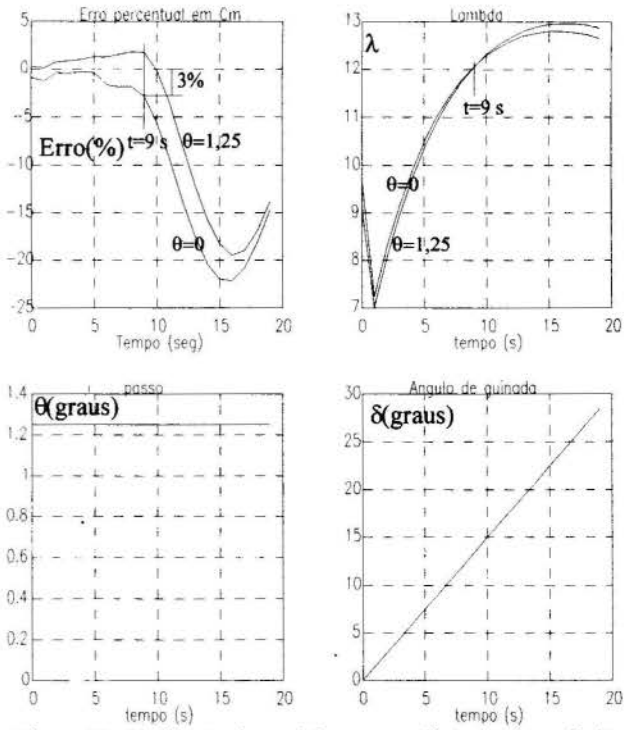


Figura 10 Validação da modelagem aerodinâmica para θ=0°; 1.25° .

Os resultados acima mostram que o erro entre o valor original, dado pela eq. (11), e o valor derivado da modelagem do conjugado aerodinâmico C_m, atinge valores superiores a 3% para t ≥ 9s quando $\lambda \geq 12$.

Grupo 2.

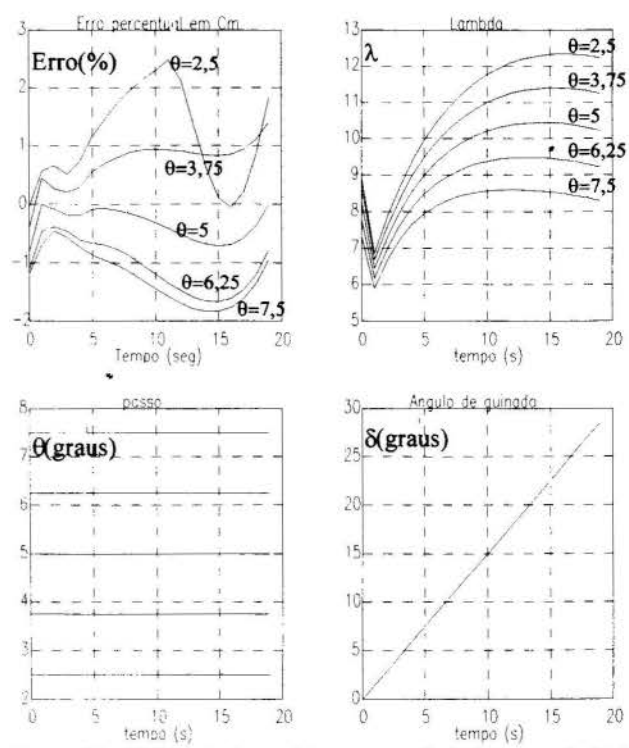


Figura 11 Validação da modelagem aerodinâmica para θ=2.5° ;.....; 7.5° .

Grupo 3.

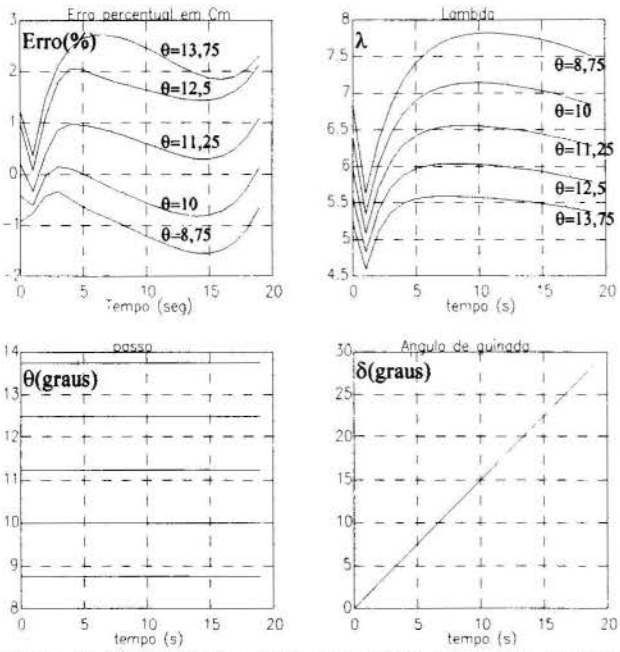


Figura 12 Validação da modelagem aerodinâmica para θ=8.75° ;.....;13.75° .

Grupo 4.

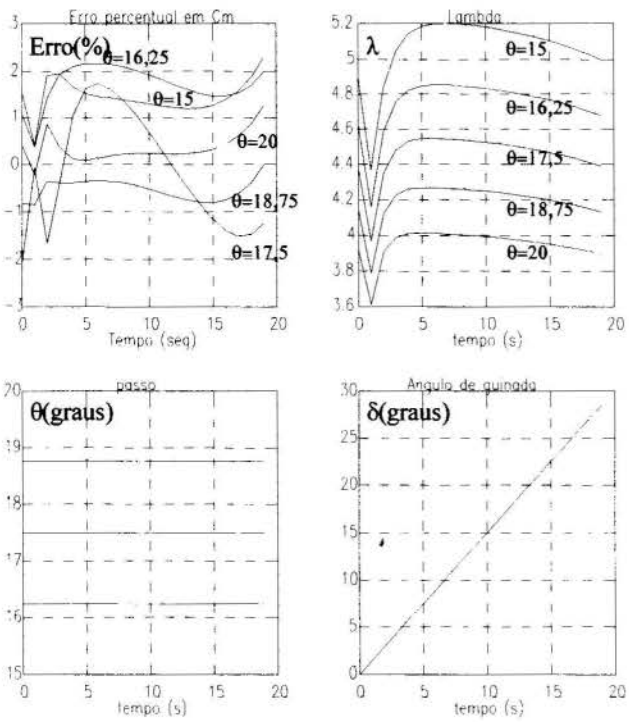


Figura 13 Validação da modelagem aerodinâmica para θ=15° ;.....; 20° .

Os resultados das figuras 11, 12 e 13 são semelhantes entre si e apresentam erros de modelagem no conjugado aerodinâmico sempre inferiores a 3%.

CONCLUSÕES

Das figuras 11, 12 e 13, onde $\theta \geq 2{,}5°$, observa-se que o erro absoluto no valor de C_m, introduzido com a modelagem aerodinâmica, é sempre menor que 3%. Na figura 10 também se verifica esta situação para $t \leq 9$s correspondente a valores de $\lambda \leq 12$. Para valores maiores de λ o erro pode chegar a 20%. Este problema não preocupa, pois os valores de λ obtidos nas simulações são bem inferiores a este limite. Na verdade, admite-se certas variações de ω, da ordem de 20%, em torno do estado de regime permanente, quando na estratégia VS Cp_{max} (Goodfellow e Smith, 1986). Ainda admitindo esta possibilidade, ter-se-ia $\lambda_{max} \cong 11{,}4$, para $\theta \cong 0°$.

Em relação ao valor máximo do erro do conjugado em 3%, este limite é aceitável tendo em vista os seguintes argumentos:

- as curvas C_q - λ são calculadas, normalmente, com base em características de perfis aerodinâmicos obtidas em túnel de vento;
- o efeito do ângulo de guinada, representado pelo cosseno cúbico na potência gerada, importa em variações de velocidade rotórica de até 2% no ciclo de 180°, o que altera simultaneamente, porém em sentido contrário, o valor "exato" de C_m em torno de 2%.
- o efeito do gradiente de velocidade do vento em turbinas de grande porte, somado aos efeitos de turbulência no vento implicam em variações do desempenho aerodinâmico real em valores, provavelmente, superiores ao valor de 3% no erro obtido com a modelagem.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abbott, I. H. and A. E. Von Doenhoff, 1959, "Theory of Wing Sections", Dover Publications, Inc, New York.

Glasgow, J. C. ; R. D. Corrigan ; D. R. Miller, 1981, "The Effect of Yaw on Horizontal Axis Wind Turbine Loading and Performance", NASA, Cheveland, pp. 307-321.

Goodfellow, D. ; G. A. Smith; G. Gardner 1986, "Control Strategies for Variable Speed Wind Energy Recovery", *Proceedings, BWEA Conference*, Cambridge, pp. 219-228.

Hassan, G., 1988, **"BLADES - User Manual"**, Garrad Hassan and Partners, Londres, 1988.

Lysen, E., 1983, **"Introduction to Wind Energy"**, Technical University of Eindhoven, Netherlands.

Marechal, L., 1987, **"Commande Optimale d' un Aerogenerateur a Vitesse Variable"**, Tese de Doutorado, Université Paul Sabatier de Toulouse, França, dez.

Medeiros, A.L.R., 1995, **"Otimização de Sistemas de Conversão de Energia Eólica de Grande Porte"**, Tese de Doutorado, UFPB (Campus II).

Vestas-Danish Wind Technology A/S, 1994, **"Vestas V39-500 kW Wind Turbine - Pitch Regulated"**, *Relatório com descrição técnica da turbina V39-500 kW.* DK-6940 Lem, Denmark , Telefax: +45-97341484.

SUMMARY

This work gives a new procedure for rotor performance modeling of large size horizontal axis wind turbines where the pitch and yaw angle are treated as variables. By simulation it was observed a maximum error equal to 3% near the operating points.

DADOS DA SIMULAÇÃO

Em regime permanente: $\omega=\omega_o=5{,}7$ rd/s; $C_{m_{rp}} \cong 105$kNm
$I=160000$ kgm^2; $\lambda_o=9{,}5$; $C_{pmax}=0{,}45$;

ABCM

VISCOUS ANALYSIS OF NUMERICALLY DESIGNED AIRFOILS FOR GENERAL-UTILITY AIRCRAFT

Bento Silva de Mattos - EMBRAER DTE/GEA/EAD
12227-901 São José dos campos - SP - Brazil

SUMMARY

General-utility wing profiles were numerically designed based on field and cruise performance criteria. A validated panel method with boundary layer routine was used to quickly design the geometries. All airfoils have a maximum thickness of around 16%, aiming to obtain a lighter wing structure. A viscous analysis was performed for a double-slotted flap configuration by using an unstructured Navier-Stokes code in order to accurately determine the polar curve for the numerically designed geometries in a configuration with high-lift devices.

INTRODUCTION

The wing size and aircraft weight are greatly affected by the wing loading. If the wing loading is reduced, the wing is larger. Some improvements are even to be expected if the wing area is increased, due to the greater area of the high-lift devices. However, additional drag and empty weight related to the larger wing will increase takeoff gross weight to perform the mission (Raymer). The requirements of takeoff distance, landing distance, climb rate, stall speed will need different wing loading to fulfill them. The lower wing loading should be selected, in order to satisfy the remained specifications. In the conceptual design, the configuration with higher max. lift coefficient (Cl_{max}) will present the higher final wing loading (Raymer). The stall speed is directly determined by the wing loading and the maximum lift coefficient. Stall speed is a major contributor to flying safety, with a substantial number of fatal accidents on account of failure to sustain flight in the approaching phase as noticed by Raymer. The greater the Cl_{max}, the lower the stall speed and landing distance. Again, a higher Cl_{max} is desired for safety and performance reasons.

The maximum lift coefficient will depend on the wing geometry, airfoil shape, flap geometry, span, leading-edge slot, slat geometry, Reynolds number, surface texture, and interference from other parts of the aircraft such as fuselage, nacelles, or pylons. However, a single engine aircraft (SEA) with a straight wing exhibits little or no interference, so that the aerodynamic characteristics of the wing profiles are nearly those of the wing itself. This is the mainly reason to numerically design a family of high lift airfoils.

An other aspect to be considered in the design process concerns the balance of the aircraft configuration. The trim force provided by the horizontal tail will increase or reduce the maximum lift, depending on the direction of the trim force. For the SEA configuration the intrinsic lower arm will dictate a larger horizontal tail to produce higher lift. Therefore, more drag, and a further reduction of the max. lift coefficient are expected. In order to minimize this problem, a wing with the lowest possible moment coefficient is highly desired. In other words, airfoils with lower moment coefficient should be highly preferred. In addition, in order to secure a lighter wing structure, the profiles should be as thick as possible; to achieve permissible aileron's hinging moment, rear-loaded trailing edge should then be avoided. This last issue conflicts with the requirement for higher Cl_{max}, since after increasing cambering for the rear portion of some existing geometries a considerable increase in max. lift coefficient was observed by running the panel code *XFOIL* (Drela, 1989).

The reasons that were exposed in the preceding paragraphs substantiate the effort to spend time designing airfoils with higher Cl_{max} , and moment coefficient around zero.

There is always a basic incompatibility in aircraft wing design: for cruise efficiency, a wing should have little camber and should operate at a high wing-loading. For takeoff and landing, a wing should have lots of lift, which means a lot of camber and a low wing-loading. High lift devices are used on aircraft to lower required landing and takeoff speeds, while retaining an efficient low drag airfoil shape for cruise flight. They may have many forms, such as leading-edge flaps, slats, plain flaps, etc. Nowadays, the design of high-lift devices has became very complex, with focus on systems that not only provide good maximum lift performance for landing approach but also good takeoff lift-to-drag ratio characteristics as well. In addition, the system must be as simple and economical as possible while retaining necessary performance targets.

Many of the flow phenomena found on multielement airfoils are presently not well understood, in particular, those associated with the physics of merging shear layers, separated flows, and boundary layer

transition and hence are not accurately modeled in most codes aimed to calculate the flow around such configurations. This type of boundary layer transition may occur in addition to natural transition of attached boundary layers and transition in laminar short bubbles. Therefore, an unstructured Navier-Stokes code with mesh adaption, the *Rampant* (Davis at al., 1993), was selected to perform the final flow analysis of airfoils designed with faster codes. This code is to be validated at EMBRAER and a flow calculation around a double-slotted flap configuration, which is taking part in the validation effort, is presented in this paper.

Studying the physics of multielement airfoils in more detail, one can compile the following list of flow features among others (Brune et al., 1990):

- Limited regions of transonic flow may appear on the upper surface of the leading edge of highly loaded flap airfoils, even though the freestream Mach number is low.
- Wakes of upstream airfoil elements often merge with boundary layers on surfaces of downstream elements. The resulting turbulent shear layer is referred to as a confluent boundary layer.
- The region of viscous flow above the surface(s) of trailing-edge flaps is relatively thick, particularly on landing configurations, often resulting in flow separation even near normal operating conditions.
- Viscous wakes frequently develop in the presence of the strong pressure gradients of adjacent airfoil elements. Off-the-surface wake flow reversal can occur if pressure gradients are adverse.
- Laminar boundary layers on downstream elements will become turbulent when merging with the wake of an upstream element at the start of a confluent boundary layer.

NUMERICAL TOOLS

The panel method code *XFOIL* was employed in the present analysis and design of the geometries considered in this work. *XFOIL* is an interactive code for the design and analysis of subsonic isolated airfoils. The inviscid formulation of the code is a simple linear-vorticity stream function panel method. A Karman-Tsien compressibility correction is incorporated allowing good compressible predictions all the way to sonic conditions.

There are two types of inverse methods incorporated in *XFOIL*: Full-Inverse and Mixed-Inverse. The Full-Inverse formulation calculates the entire airfoil geometry of the entire surface speed distribution. The Mixed-Inverse formulation is simply the inviscid panel formulation except that instead of the panel vortex strengths being the unknowns. Only a part of the airfoil is modified at any one time. Allowing the panel geometry to be a variable results in a non-linear problem, but this is solved in a straightforward manner by employing a full-Newton method.

The boundary layers and wake are described with a two-equation lagged dissipation integral formulation and Orr-Sommerfeld transition criterion. The entire viscous solution is strongly interacted with the incompressible potential flow via the surface transpiration model. The drag is determined from the wake momentum thickness far downstream.

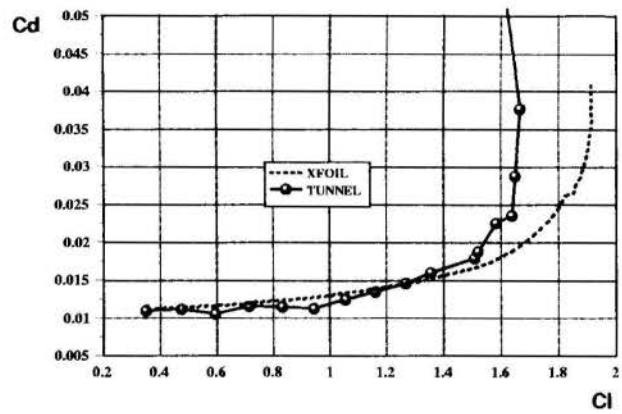


Fig. 1 - XFOIL Calculated Polar for the *EA160316* Profile vs. Wind-Tunnel Coefficients. Mach = 0.21, Reynolds = 2.2 10^6.

In order to evaluate the ability of the code in predicting flow at highlift conditions, a test case was run by using the 16% thick aft-cambered *EA160316* profile, named *CBARAIZ*. This geometry was discretized into 120 flat panels with sufficient resolution at the trailing, and leading edge to capture the viscous effects related to the separated flow to be found in the extreme conditions of the calculation. The numerical polar for this geometry concerning a flow with fixed transition placed at 5% of the chord was then obtained. **Fig. 1** shows a comparison between the calculated aerodynamic coefficients and their corresponding experimental values (Sadahaki, 1988). The measured drag coefficient was obtained by integrating the pressure coefficients acquired on a rake mounted far rear from the model. As can be inferred from the results, the Cl_{max} that can be obtained from the calculations is approximately 13% higher respecting the experimental value from wind tunnel. There is an very good overall agreement between the calculated and measured drag coefficients for lift coefficient up to 1.55.

Pressure coefficient (Cp) distributions for a moderate Cl are plotted in **Fig. 2**. They are related to the same flow conditions from **Fig. 1**. As can be seen, *XFOIL* calculated a weaker suction peak at the leading edge than that acquired in the wind tunnel. The decambering effect caused by the viscous layer in the Cp distribution at the trailing edge of rear-loaded airfoils was properly captured by the viscous model from *XFOIL*.

A lower-order panel (Ahmed, 1973) method coupled with a vortex-in-cell and a new source-in-cell method (Ribeiro et al., 1993) to allow the calculation of wake roll-up of complete aircraft configurations was employed to compute subsonic flow around a wing lofted with a selected profile from the designed airfoil set. The panel method used to perform the mentioned analysis is an implementation of the Hess and Smith method. The

source panels are quadrilateral or triangular and have uniform distribution of sources. Lifting inducing parts bound a vortex network on their camber surface, which is organized in streamwise strips. Wake vorticity is represented by line vortices starting at the trailing edges of the vortex network.

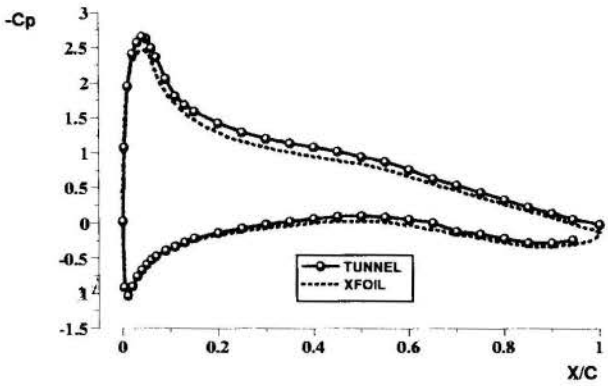


Fig. 2 - Cp Distributions for the *EA160316* Profile. Mach = 0.21, Cl = 1.04, and Reynolds = 2.2.10^6.

The *Rampant* code (Davis et al., 1993) has the desired models and tools to calculated the complex flow patterns expected to be found around multielement configurations. Elements of interest include the more accurate *RNG* k-ε turbulence model, unstructured mesh with adapation capability, an explicit multi-stage Runge-Kutta with multigrid, and a very user-friendly package for making, and graphically monitoring solutions.

THE GEOMETRIES

Some geometric data for the new geometries designed with the *XFOIL* code, and the *EA160316* airfoil are displayed in **Tab. I**:

Airfoil	max. Thickness (%)	max. Camber (%)
HL1B	16.29	3.858
HL3C	15.70	2.395
HL8	15.09	3.832
HL1L	16.20	2.900
HL1P	16.18	1.489
EA160316	16.00	1.630

Tab. I - Brief Description of the Airfoils.

All but the *HL1L* and *EA160316* profiles have none or small camber on their rear portion. The *HL1B* profile owns the highest max. camber and thickness. The design task embodies basically the prescription of Cp distribution on selected portions of existing airfoils, for which desired improvements in the aerodynamic characteristics are to be achieved. The good highlift characteristics of the final airfoils can be partly credited to the *Cp* distributions, which were imposed with *XFOIL* in Mixed-Inverse mode: a strong but thin suction peak at the leading edge followed by a flat distribution at moderate *Cl* revealed more favorable to attain higher max. lift coefficients.

In **Figs. 3-7**, one can see the *Cp* distributions calculated by *XFOIL* for the designed geometries at 0.21 Mach number, 1.0 lift coefficient, and Reynolds number of 2.2 x 10^6. The dashed line represents the inviscid distribution, and the solid one the viscous calculation. All profiles present approximately the same lift to drag ratio due to the fixed transition. The *HL8* geometry has a slightly nose droop, which is made perceptible through a waving of the lower-side *Cp* distribution (**Fig. 7**).

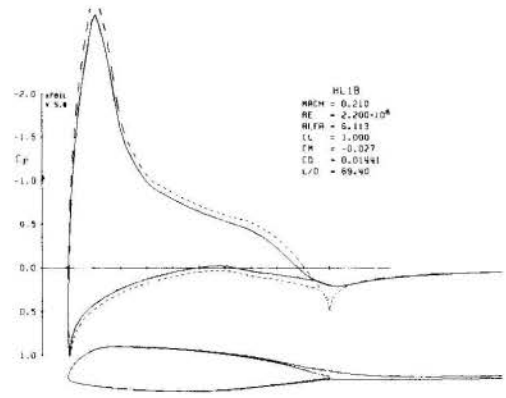


Fig. 3 - Cp Distribution for the *HL1B* Profile. Mach = 0.21, Reynolds 2.2 10^6.

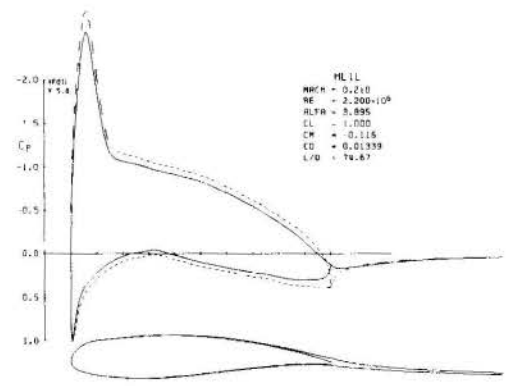


Fig. 4 - Cp Distribution for the *HL1L* Profile. Mach = 0.21, Reynolds 2.2 10^6.

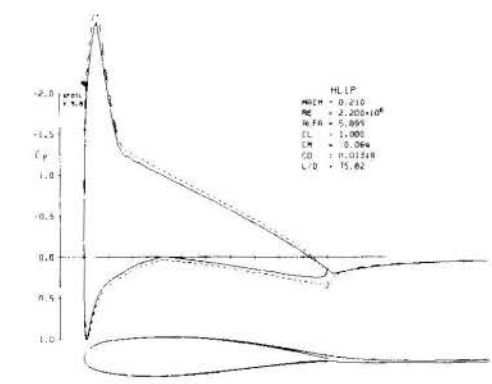


Fig. 5 - Cp Distribution for the *HL1P* Profile. Mach = 0.21, Reynolds 2.2 10^6.

The flow calculations from the **Figs. 3 - 7** for the designed geometries present in effect the same lift to drag ratio. This is due to the fixed transition at the leading edge, which equals the drag for a given moderate lift coefficient, if the remained conditions are maintained. For calculations leaving the boundary layer to grow and change freely, this picture could be quite different. The nose droop from the *HL8* profile, for example, causes the flow to transitionate at the leading-edge, lowering consequently the lift to drag ratio. However, for a general utility aircraft simple, anti-ice devices mounted in the forward portion of the wing deform considerably the shape of the leading edge causing the flow to become earlier turbulent. Thus, for a SEA configuration, techniques as drooping the nose of a profile to obtain higher max. lift coefficient are to be considered seriously.

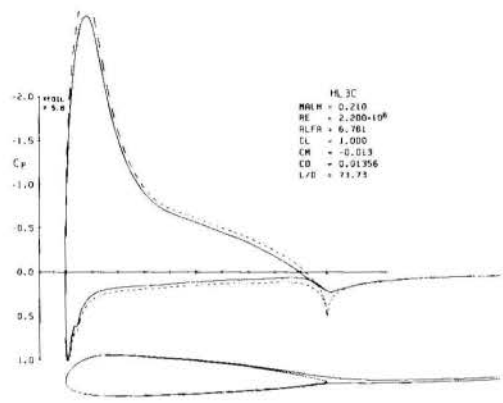


Fig. 6 - Cp Distribution for the *HL3C* Profile. Mach = 0.21, Reynolds 2.2 10^6..

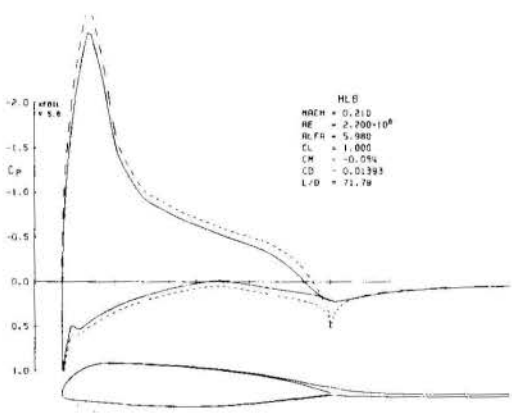


Fig. 7 - Cp Distribution for the *HL8* Profile. Mach = 0.21, Reynolds 2.2 10^6.

Cl vs. *Cd* CURVE

Fig. 8 shows a comparison among several polar obtained throughout calculations with *XFOIL*. As reference the curve for the *EA160316* airfoil is also included. A fixed transition was set at 5% of the chord only on the upper side. The Mach number relative to this calculation is 0.20, and the Reynolds number 3.10^6. **Tab. II** lists the numerical Cl_{max} attained by the designed airfoils for this flow conditions.

The *HL1L* and *HL1B* geometries present the highest and lowest max. lift coefficient among the calculated values. The flow for the *HL1L* airfoil stalls at a higher angle of attack (α_{max}). The drag rise near the stall region for the *HL1B*, and the *HL8* profiles are something higher such that they are discharged for further analysis.

Airfoil	Cl_{max}	α_{max} (degree)
HL1B	1.85	17.5
HL3C	1.99	19.5
HL8	1.90	18
HL1L	> 2.19	> 20
HL1P	2.05	19.5
EA160316	1.97	17.5

Tab. II - High Lift Characteristics of the Airfoils. Mach = 0.20, Reynolds 3.10^6.

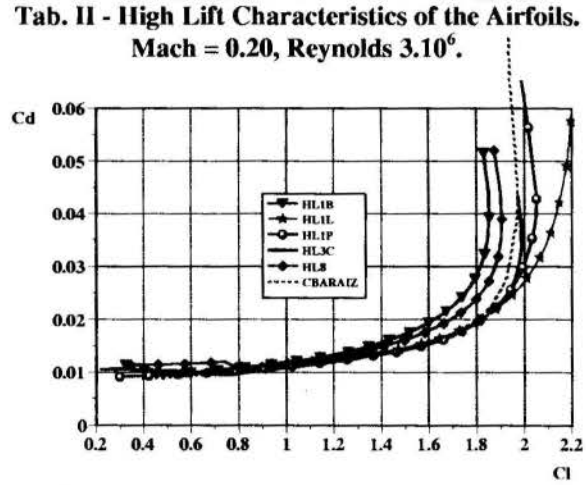


Fig. 8 - Cl vs. Cd Curve Obtained with the XFOIL code. Mach = 0.20, Reynolds 3.10^6.

MOMENT COEFFICIENT

The moment coefficient evolution for the profiles is plotted in **Fig. 9.** As can be seen, The *HL1L* airfoil reveals higher absolute moment coefficient. For the remained designed airfoils, the moment coefficients fall within acceptable limits.

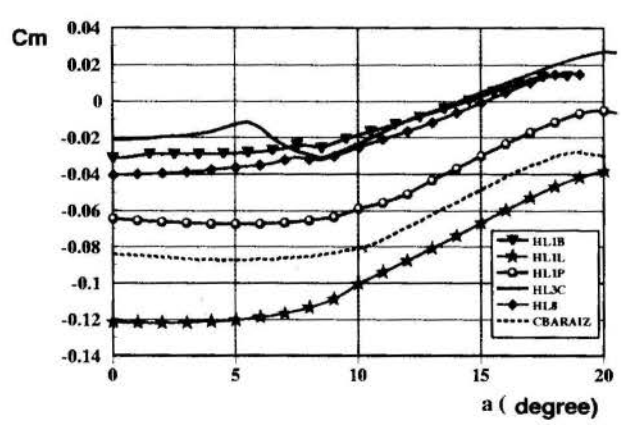


Fig. 9 - Moment Coefficient Evolution by Changing the Angle of Attack. XFOIL, Mach = 0.20, Reynolds = 3.10^6.

THREE-DIMENSIONAL ANALYSIS

Based on the presented results, the airfoils *HL3C*, and *HL1P* satisfy at best the requisites issued for a SEA configuration. In the future, high-lift devices will be incorporated to the designed profiles in order to derive a Cl_{max}, which will then define the wing dimensions. A straight wing, conceived for a single-engine general utility aircraft, was discretized into 752 panels to evaluate the differences between the two- and three-dimensional flows. The subsonic flow at an angle of attack of 4 degrees was then calculated by using a low-order panel code. The configuration has 11.45 aspect ratio, taper ratio of 0.83, leading-edge sweep at the tip, and was lofted with the *HL3C* geometry.

The result from all this effort can be seen in **Fig. 10**. The three-dimensional flow refers to a midspan wing station. Except for the leading-edge suction peak, there are no significant differences between the inviscid *Cp* distribution calculated by *XFOIL* and *PAN3D*. This substantiate the assertion concerning the importance in proceeding with the numerical design of airfoils for optimized general utility aircraft configurations.

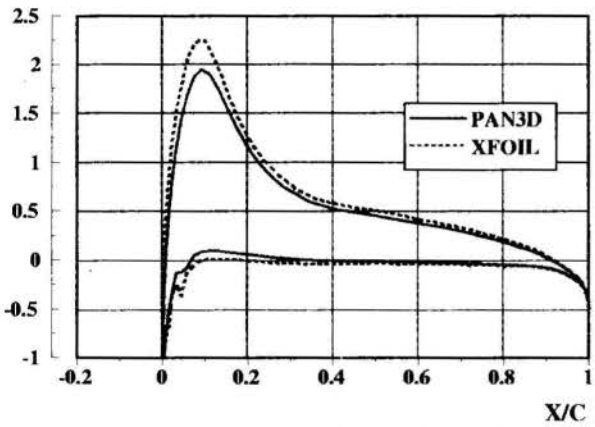


Fig. 10 - Two- and Three-Dimensional Flow Calculations. Mach = 0.10, α = 4°.

VISCOUS ANALYSIS BY USING A NAVIER-STOKES UNSTRUCTURED CODE

The unstructured adapted mesh-around a double-slotted flap configuration is shown in **Fig. 11**. The entire mesh consists of 37,857 triangular cells, and 19,341 nodes after adaption. The main element of the flap configuration is derived from the *EA160316* airfoil with 16% max. thickness, and the flap is deflected 35° relative to the chordline of the main element. A test case for this configuration was run on a *Silicon Graphics Power Onyx* workstation with two processors. The chosen angle of attack was 11.74°, the Mach number 0.202, and the Reynolds number 2.10^6 . The solution process took approximately 2200 iterations to lower the residual four orders of magnitude by employing a two-step multigrid. The calculated and measured *Cp* distribution for the profile, vane, and flap can be seen in **Figs. 12, 13**, and **14**, respectively. The experimental data for this configuration were acquired at the subsonic wind tunnel facilities from the *Centro Técnico Aeroespacial*, CTA, São José dos Campos. As can be inferred from the results, there is an overall very good agreement between experimental and calculated *Cp* distributions.

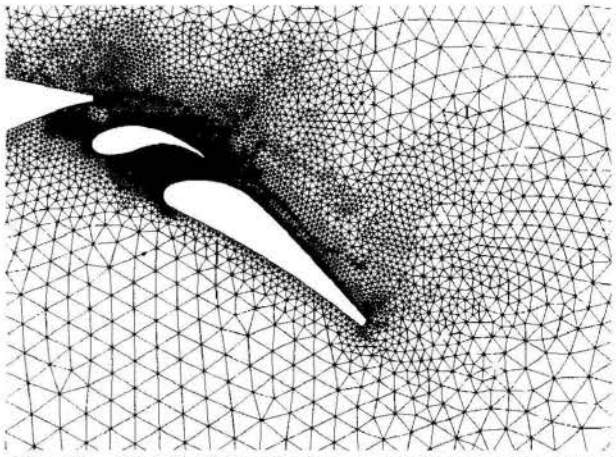


Fig. 11 - Detail of the Unstructured Mesh around the double-slotted Flap Configuration.

The calculated and measured *Cp* distribution for the profile, vane, and flap can be seen in **Figs. 12, 13**, and **14**, respectively. The experimental data for this configuration was acquired at the subsonic wind tunnel facilities in the *Centro Técnico Aeroespacial* (CTA), São José dos Campos. As can be inferred from the results, the overall agreement among experimental and calculated *Cp* distributions is very good. The main purpose behind the use of sophisticated numerical tools as the *Rampant* code is the ability to test new ideas for configurations by saving time and money replacing some wind-tunnel tests. Some work in this direction can be supported by these results among others (Davis et al., 1993).

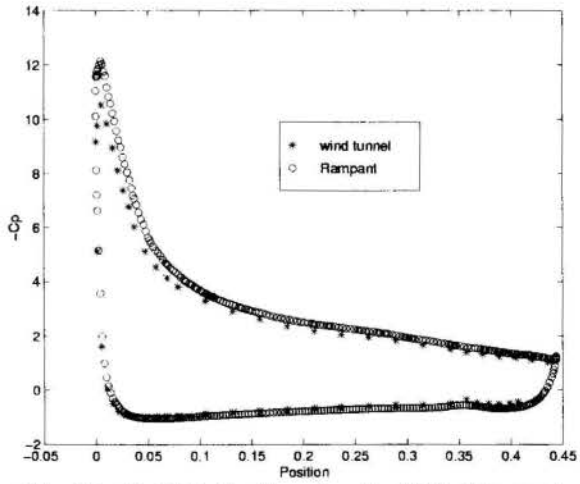


Fig. 12 - Cp Distributions for the Main Element. Mach = 0.202, α = 11.74°, Reyn = 2.10^6.

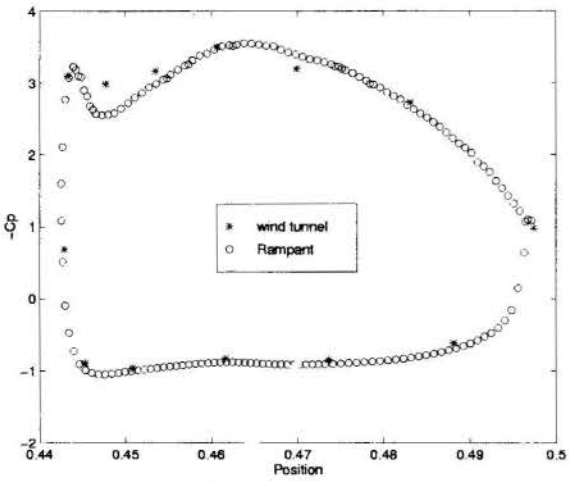


Fig. 13 - Cp Distributions for the Vane. Mach = 0.202, α = 11.74°, Reyn = 2.10^6.

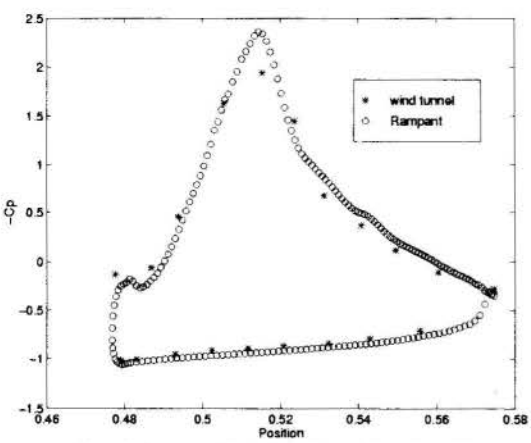


Fig. 14 - Cp Distributions for the Flap. Mach = 0.202, α = 11.74°, Reyn = 2.10^6.

CONCLUDING REMARKS

Airfoils were numerically designed aiming optimization of general utility single-engine aircraft configurations. The max. thickness for the geometries is approximately 16%. The actual max. lift coefficients are expected to be higher than 1.67 at 0.20 number of Mach, and 3.10^6 Reynolds number. Two airfoils were selected for. further analysis. Both fulfill the requirements for a high-lift good behavior and low moment coefficients. The principal advantage considering the early *EA160316* airfoil refers to the decambered rear portion of the new airfoils, which propitiate lower aileron's hinge moment, and additionally lower pitch moment for reduced trim drag.

The *HL3C* geometry, selected for further analysis, was used to compose a subsonic wing configuration and the flow calculated by using a lower-order panel method, which is also suited to handle wake roll-up. The comparison of the calculated *Cp* distribution for a station localized at midspan with an analogous calculation performed by the code *XFOIL* shows no significant difference between both distributions. This attest the assumption that for such configurations the flow around the profile geometry is quite similar for a great portion of the wing to the three-dimensional flow.

The *Rampant* code has demonstrated to be capable to accurately calculate the flow around multielement configurations. In the near future, the code will be employed to determine the *Cl x Cd* curve before and beyond the Cl_{max}. Concerning to the design and optimization of high-lift airfoil design, each element of a high-lift airfoil configuration is strongly affected by its neighbors. The limited options for improving high-lift airfoil are chord length, angle, gap, and overlap of each leading- and trailing-edge flap can be varied to some extent to achieve the desired performance.

BIBLIOGRAPHY

Raymer, D. P., *Aircraft Design: A Conceptual Approach*, AIAA Educational Series, 2nd Edition, Washington, DC.

Drela, M., "XFOIL: An Analysis and Design System for Low Reynolds Number Airfoils," *Conference on Low Reynolds Number Aerodynamics*, University Notre Dame, June 1989

Brune, G. W., and McMasters, H., "Computational Aerodynamics Applied to High-Lift Systems," *Applied Computational Aerodynamics*, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 125, 2nd Edition, 1990.

Davis, W. H., and Matus, R. J., "High Lift Multiple Element Airfoil Analysis with Unstructured Grids." *11th AIAA Applied Aerodynamics Conference*, Aug. 9-11, 1993.

Sadahaki, U., "Ensaio CBA-123/Bidimensional Perfil EMB. EA160316 (root) e EA160313 (tip)," Report n° PAR-L-87/04, CTA, Brazil, 1988.

Ahmed, S.R., "Calculation of the Inviscid Flow Field Around Three-Dimensional Lifting Wings, Fuselages, and Wing-Fuselage Combinations Using the Panel Method," DFVLR Report DLR-FB 73-102, West-Germany, 1973.

Ribeiro, R. S., and Resende, O. C., "Computation of Wake Roll-Up for Complete Aircraft Configurations, " *AIAA Applied Aerodynamic Conference*, Monterey, CA, Aug. 9-11, 1993.

UM MÉTODO PARAMETRIZADO PARA A DETERMINAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DE SUSTENTAÇÃO SOBRE ASAS A PARTIR DA TEORIA DA LINHA SUSTENTADORA

Ricardo L. U. de F. Pinto e Marcos V. Bortolus
Departamento de Engenharia Mecânica da UFMG
31270-901 - Belo Horizonte - MG - Brasil

RESUMO

Apresenta-se um método para a determinação da sustentação em asas a partir da Teoria da Linha Sustentadora de Prandtl, baseado na parametrização da distribuição de circulação. Obtido com a aplicação do método de colocação após uma discretização do tipo elementos finitos, supondo a circulação constante sobre cada seção, o método possui um desenvolvimento muito simples. São resolvidos alguns exemplos cujos resultados são comparados com o Método de Multhopp.

INTRODUÇÃO

O Método dos Elementos Finitos tem sido uma das principais metodologias utilizadas na solução numérica de problemas de várias áreas da engenharia (Fletcher, 1984) e, particularmente, em problemas termofluidodinâmicos (Baker, 1985). Entretanto, no caso particular da determinação numérica de escoamentos em torno de superfícies aerodinâmicas (Landahl e Stark, 1968),um problema fundamental para o projeto de aeronaves, hélices e aerofólios em geral, muito pouco tem sido encontrado relacionado com a aplicação de técnicas do tipo elementos finitos. A técnica mais tradicional utilizada para a determinação numérica da distribuição de sustentação sobre asas finitas baseada na Equação da Linha Sustentadora de Prandtl (Schlichting e Truckenbrodt, 1979), tem sido o Método de Multhopp (Multhopp, 1938, 1950). Trata-se de um procedimento numérico baseado em expansões em séries de Fourier, cujos coeficientes levam a um sistema linear de equações algébricas para a determinação da circulação sobre pontos discretos, obtidos de acordo com uma variável angular auxiliar que faz com que a discretização fique propositadamente mais concentrada nas pontas.

Neste artigo, como parte de uma pesquisa sobre o desenvolvimento de técnicas numéricas para a solução de equações integro-diferenciais, apresenta-se uma técnica, baseada no Método dos Elementos Finitos, para a solução numérica da Equação da Linha Sustentadora de Prandtl.

A metodologia, muito simples em sua concepção teórica e desenvolvimento, compreende uma discretização do escoamento ao longo da envergadura da asa, dentro do contexto de elementos finitos, utilizando aproximações constantes por partes para a circulação, e a aplicação posterior do Método de Colocação (Fletcher, 1984).

A técnica possui convergência um pouco mais lenta do que o Método de Multhopp, conforme observou-se através da solução de alguns problemas particulares. Entretanto, diferentemente do Método de Multhopp, as equações discretizadas são obtidas sem particularizar a malha a priori, a qual pode ser tanto uniforme quanto não-uniforme. Isto torna o método completamente flexível quanto à escolha a posteriori da malha de discretização.

Apresenta-se resultados para a distribuição de circulação sobre asas retas e sobre asas trapezoidais com afilamento 0.5, obtidos de três maneiras: i) com a técnica de elementos finitos com malha uniforme; ii) com a técnica de elementos finitos utilizando uma malha não uniforme semelhante à sugerida por Multhopp; ii) com o Método de Multhopp. Os resultados têm a convergência analisada para cada método através do aumento do número de elementos e comparando os três métodos simultaneamente para um mesmo número de elementos.

MODELO MATEMÁTICO

Segundo a Teoria da Linha Sustentadora de Prandtl (Schlichting e Truckenbrodt, 1979), a distribuição de circulação de uma asa com envergadura finita deve satisfazer a seguinte equação:

$$\alpha(y)=\frac{1}{2\pi}\int_{-1}^{1}\frac{\gamma'(\eta)}{y-\eta}d\eta+\frac{2\lambda(y)}{a_0(y)}\gamma(y), \quad y\in[-1,1], \qquad (1)$$

onde y representa a coordenada normalizada ao longo da envergadura, tal que $y=-1$ corresponde à extremidade esquerda da asa e $y=1$ corresponde à extremidade direita, $\alpha(y)$, $\gamma(y)$ e $a_0(y)$ denotam o ângulo de ataque, a circulação e a inclinação da curva de sustentação do perfil aerodinâmico na secção y, respectivamente, e

$$\lambda(y)\triangleq\frac{b}{c(y)},$$

representa o afilamento local, sendo b a envergadura e $c(y)$ a corda na seção y.

A Eq. (1) possui uma singularidade em $\eta=y$, de modo que a integral em (1) deve ser entendida no sentido impróprio. Assim, para uma maior coerência matemática, deve-se escrever a Eq.(1) na forma:

$$\alpha(y)=\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{2\pi}\left\{\int_{-1}^{y-\epsilon}\frac{\gamma'(\eta)}{y-\eta}d\eta+\int_{y+\epsilon}^{1}\frac{\gamma'(\eta)}{y-\eta}d\eta\right\}+$$

$$+\frac{2\lambda(y)}{a_0(y)}\gamma(y), \qquad y\in[-1,1]. \qquad (2)$$

Realizando uma integração por partes das integrais presentes na Eq. (2), e considerando que nas pontas das asas a circulação deve se anular, ou seja, $\gamma(-1)=\gamma(1)=0$, obtem-se:

$$\int_{-1}^{y-\epsilon}\frac{\gamma'(\eta)}{y-\eta}d\eta+\int_{y+\epsilon}^{1}\frac{\gamma'(\eta)}{y-\eta}d\eta=\frac{\gamma(y-\epsilon)}{\epsilon}+\frac{\gamma(y+\epsilon)}{\epsilon}-$$

$$-\int_{-1}^{y-\epsilon}\frac{\gamma(\eta)}{(y-\eta)^2}d\eta-\int_{y+\epsilon}^{1}\frac{\gamma(\eta)}{(y-\eta)^2}d\eta. \qquad (3)$$

Considerando a expressão (3) e dividindo o domínio $y \in [-1,1]$ em N lementos, dentro do espírito do Método dos Elementos Finitos, pode-se escrever, no lugar da Eq. (2):

$$2\pi\alpha(y)=-\sum_{e=1,e\neq i}^{N}\int_{y_{e-1}}^{y_e}\frac{\gamma(\eta)}{(y-\eta)^2}d\eta+\lim_{\epsilon\to 0}\left\{\frac{\gamma(y-\epsilon)}{\epsilon}+\right.$$

$$\left.+\frac{\gamma(y+\epsilon)}{\epsilon}-\int_{y_{i-1}}^{y-\epsilon}\frac{\gamma(\eta)}{(y-\eta)^2}d\eta-\int_{y+\epsilon}^{y_i}\frac{\gamma(\eta)}{(y-\eta)^2}d\eta\right\}+$$

$$+\frac{4\pi\lambda(y)}{a_0(y)}\gamma(y), \qquad y\in[y_{i-1},y_i], \qquad i=1,\ldots,N; \qquad (4)$$

onde os elementos $[y_{e-1},y_e]$ não têm necessariamente a mesma extensão.

Considere agora, para a circulação $\gamma(\cdot)$, no contexto do Método dos Elementos Finitos, uma aproximação na forma:

$$\gamma_e(y)=\gamma_e=\text{const.}, \quad y\in[y_{e-1},y_e], \quad e=1,\ldots,N. \qquad (5)$$

Note que, de acordo com (5), a circulação $\gamma(\cdot)$ está sendo admitida constante sobre cada elemento. Com esta aproximação, $\gamma(\cdot)$ pode ser passada para fora das integrais presentes na Eq. (4), que passa a ser escrita como:

$$2\pi\alpha(y)=-\sum_{e=1,e\neq i}^{N}\gamma_e\int_{y_{e-1}}^{y_e}\frac{d\eta}{(y-\eta)^2}+\lim_{\epsilon\to 0}\left\{\frac{\gamma(y-\epsilon)}{\epsilon}+\right.$$

$$\left.+\frac{\gamma(y+\epsilon)}{\epsilon}-\gamma_e\int_{y_{i-1}}^{y-\epsilon}\frac{d\eta}{(y-\eta)^2}-\gamma_e\int_{y+\epsilon}^{y_i}\frac{d\eta}{(y-\eta)^2}\right\}+$$

$$+\frac{4\pi\lambda(y)}{a_0(y)}\gamma_i, \qquad y\in[y_{i-1},y_i], \qquad i=1,\ldots,N. \qquad (6)$$

Agora as integrais presentes em (6) podem ser resolvidas de forma exata, levando a:

$$2\pi\alpha(y)=\sum_{e=1}^{N}\gamma_e\left\{\frac{1}{y-y_e}-\frac{1}{y-y_{e-1}}\right\}+$$

$$+\lim_{\epsilon\to 0}\left\{\frac{\gamma(y-\epsilon)}{\epsilon}+\frac{\gamma(y+\epsilon)}{\epsilon}+\gamma_e\frac{2}{\epsilon}\right\}+$$

$$+\frac{4\pi\lambda}{a_0}\gamma_i, \qquad y\in[y_{i-1},y_i], \qquad i=1,\ldots,N. \qquad (7)$$

Note que o termo correspondente a $e=i$ está agora incluido no somatório.

A expressão (7), em virtude da aproximação imposta a $\gamma(\cdot)$, não pode ser identicamente satisfeita sobre todo o domínio $y\in[-1,1]$. Para sua satisfação aproximada, no presente artigo aplica-se o Método da Colocação, que representa um caso particular do Método dos Resíduos Ponderados (Fletcher, 1984). Para este fim impõe-se que a Eq. (7) seja satis-feita de maneira exata no ponto médio de cada elemento, ou seja, para os seguintes valores de y:

$$\bar{y}_e \triangleq \frac{y_{e-1}+y_e}{2}, \qquad e=1,\ldots,N. \qquad (8)$$

Considerando (5), sobre os pontos de colocação tem-se:

$$\gamma(\bar{y}_e)=\gamma_e, \quad e=1,\ldots,N \qquad (9)$$

Por sua vez, em virtude de (5) e (8), também vale:

$$\gamma(\bar{y}_e-\epsilon)=\gamma(\bar{y}_e+\epsilon)=\gamma_e, \qquad e=1,\ldots,N; \qquad (10)$$

o que fornece:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left\{\frac{\gamma(\bar{y}_i-\epsilon)}{\epsilon}+\frac{\gamma(\bar{y}_i+\epsilon)}{\epsilon}-\gamma_e\frac{2}{\epsilon}\right\}=0. \qquad (11)$$

Assim, em substituição a (7), pode-se escrever:

$$2\pi\bar{\alpha}_e=\sum_{e=1}^{N}\gamma_e\left\{\frac{1}{\bar{y}_e-y_e}-\frac{1}{\bar{y}_e-y_{e-1}}\right\}+$$

$$+\frac{4\pi\bar{\lambda}_e}{\bar{a}_{0e}}\gamma_e, \qquad e=1,\ldots,N; \qquad (12)$$

onde:

$$\bar{\alpha}_e \triangleq \alpha(\bar{y}_e)$$

$$\bar{\lambda}_e \triangleq \lambda(\bar{y}_e)=\frac{2b}{c(\bar{y}_e)}$$

$$\bar{a}_{0e} \triangleq a_0(\bar{y}_e).$$

Numa forma mais compacta, pode-se escrever a Eq. (12) como:

$$\sum_{e=1}^{N}L_{(e,i)}\gamma_e=2\pi\bar{\alpha}_e \qquad (13)$$

onde

$$(e\neq i) \quad L_{(e,i)} \triangleq \frac{1}{\bar{y}_e-y_i}-\frac{1}{\bar{y}_e-y_{i-1}},$$

$$(e=i) \quad L_{(i,i)} \triangleq \frac{4\pi\bar{\lambda}_i}{\bar{a}_{0i}}+\frac{4}{y_i-y_{i-1}}.$$

Considerando ainda que a distribuição de circulação sobre a asa deve ser simétrica em relação ao centro da asa, as N equações presentes em (13) podem ser reęscritas numa forma reduzida. Para isso, considerando-se $\gamma_{N-e}=\gamma_e$, pode-se escrever no lugar de (13):

$$A\gamma=2\pi\bar{\alpha}, \qquad (14)$$

onde:

$$\gamma \triangleq [\gamma_1,\ldots,\gamma_M]'$$

$$\bar{\alpha} \triangleq [\bar{\alpha}_1,\ldots,\bar{\alpha}_M]'$$

$$M \triangleq \frac{N+1}{2}, \quad (N \text{ ímpar})$$

$$A_{(e,j)} \triangleq L_{(e,j)}+L_{(e,N+1-j)}, \qquad e,j=1,\ldots,M; \quad (j\neq M)$$

$$A_{(e,M)} \triangleq L(e,M), \qquad (j=M)$$

que representa um sistema de M equações lineares em M incógnitas.

RESULTADOS

O método apresentado neste trabalho e o Método de Multhopp foram simultaneamente aplicados a uma asa sem torção com perfil laminar do tipo placa plana ($a_0=2\pi$), considerando afilamento 1 (forma em planta retangular) e afilamento 1/2 (forma em planta trapezoidal). No caso do método apresentado neste artigo, foram utilizados dois tipos de malha. Uma malha uniforme com

$$y_e=\frac{2e}{N}-1, \qquad i=0,1,\ldots,N;$$

e uma malha não-uniforme obtida utilizando a mesma discretização do Método de Multhopp, ou seja:

$$y_e=\cos(\theta_e), \quad \theta_e=\frac{e\pi}{N}, \quad i=0,1,\ldots,N.$$

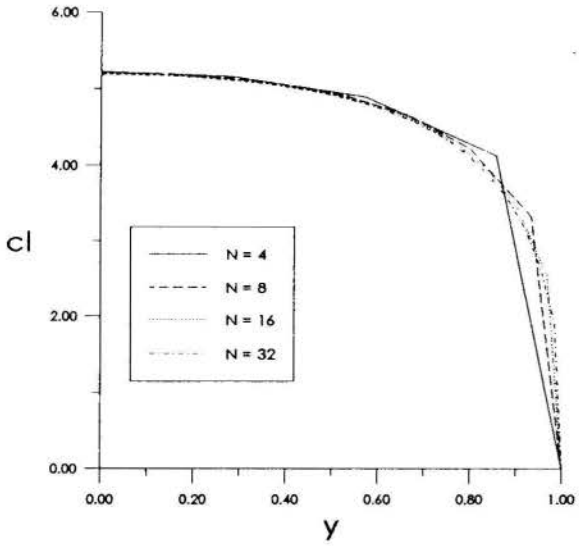


Fig. 1 - Asa Retangular: Elementos Finitos com Malha Uniforme

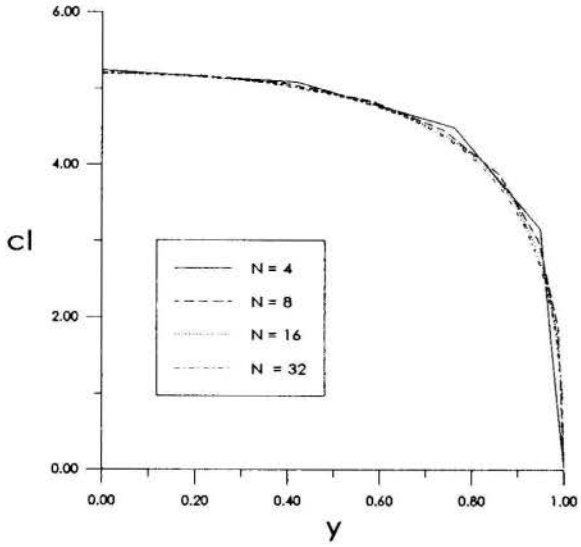


Fig. 2 - Asa Retangular: Elementos Finitos com Malha Não-Uniforme

Nos dois casos, a título de normalização, adotou-se:

$c_R=1$ (corda na raíz)
$A_R=6$ (alongamento)
$\alpha=1$rd (ângulo de ataque).

A Fig. 1 apresenta os resultados obtidos pelo método aqui proposto com uma malha uniforme (N elementos de mesma dimensão). As curvas correspondem a uma duplicação progressiva de N, de 4 até 32.

Os resultados correspondentes para o caso de uma malha não-uniforme obtida utilizando a mesma discretização do Método de Multhopp estão mostrados na Fig. 2.

A Fig. 3 mostra os resultados correspondentes à solução pelo Método de Multhopp.

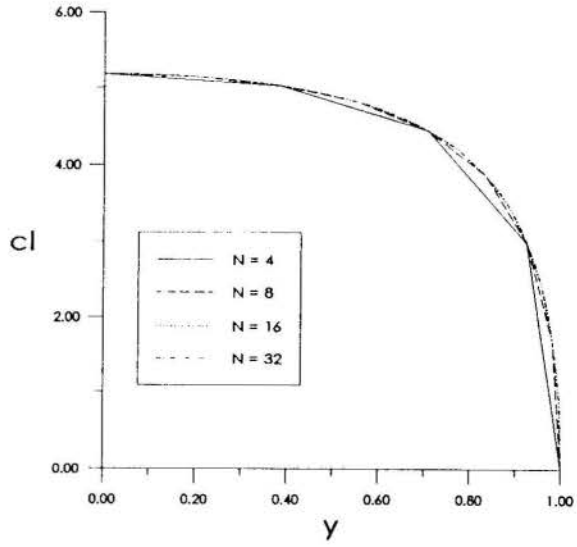


Fig. 3 - Asa Retangular: Método de Multhopp

As Figs. 4 e 5 comparam para 8 e 32 elementos, respectivamente, os resultados obtidos pelas três maneiras: i) Elementos Finitos com malha uniforme (EF.MU); ii) Elementos Finitos com malha não-uniforme (EF.MN); e iii) Método de Multhopp (MULTHOPP).

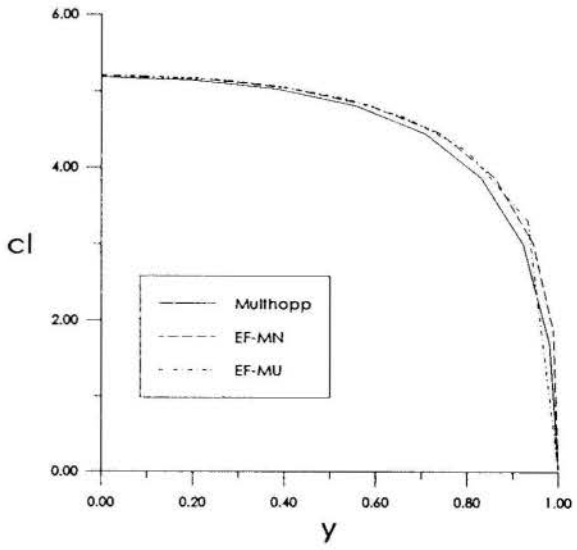


Fig. 4 - Asa Retangular: Resultados para $N=8$

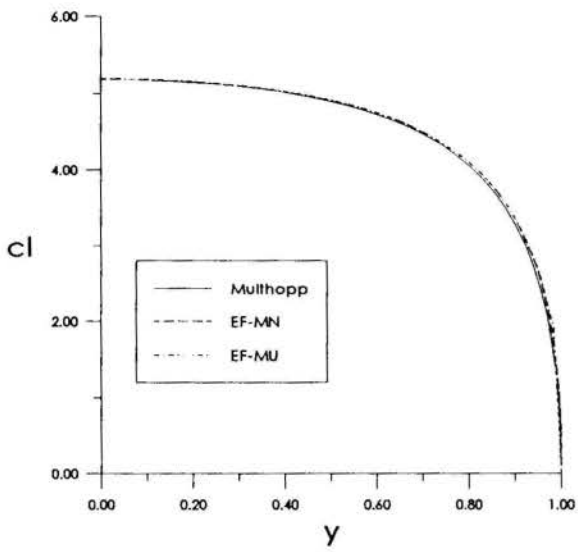


Fig. 5 - Asa Retangular: Resultados para N=32

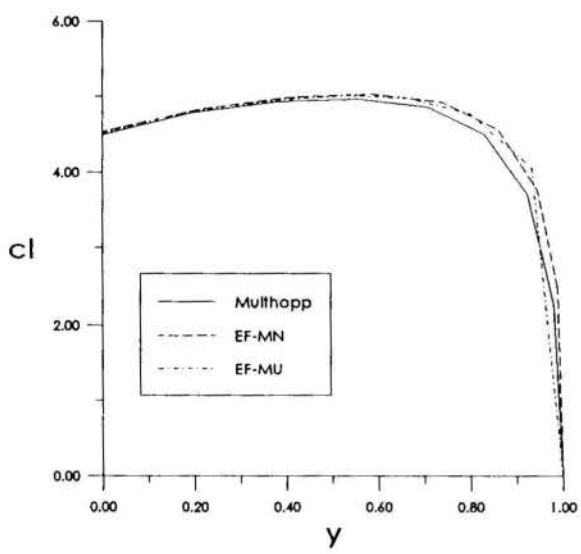


Fig. 6 - Asa Trapezoidal: Resultados para N=8

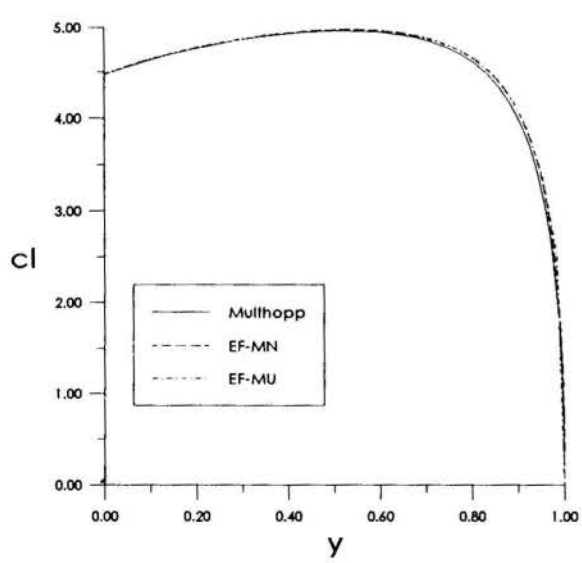


Fig. 7 - Asa Trapezoidal: Resultados para N=32

Nas Figs. 6 e 7 estão mostrados os resultados obtidos para a asa trapezoidal pelas três maneiras para N=8 e N=32, respectivamente.

É visível a convergência das três técnicas para a mesma solução, sendo a convergência no caso do EF.MU um pouco mais lenta que para o EF.MN, que por sua vez, é mais lenta que para o Método de Multhopp.

COMENTÁRIOS

i) A convergência mais rápida do Método de Multhopp em relação ao método do presente artigo era previsível. De fato, isto já era esperado pois o desenvolvimento do Método de Multhopp utiliza recursos bem mais elaborados que a técnica de Elementos Finitos aqui apresentada. Também era de se esperar uma convergência um pouco mais acelerada com a malha não-uniforme, que é mais concentrada nas pontas das asas, onde há uma variação mais acentuada da circulação.

ii) Embora não apresentado nas figuras anteriores, soluções foram obtidas também para N=64. Neste caso, a diferença entre os resultados obtidos pelos três métodos foi bastante pequena sendo imperceptível na escala das figuras.

iii) Deve ser considerado que a metodologia aqui adotada utiliza a forma mais simples de aplicação do Método dos Elementos Finitos: aproximações constantes por partes e o método de colocação. É de se esperar que a convergência seja muito mais rápida se adotadas técnicas de interpolação mais precisas, por exemplo aproximações de primeiro ou de segundo grau, ou técnicas de ponderação dos resíduos mais robustas, por exemplo, o Método dos Mínimos Quadrados. Por outro lado, o desenvolvimento será, nestes casos, mais elaborado.

iv) É importante observar que o desenvolvimento apresentado no presente artigo, diferentemente de outros métodos (Multhopp, 1938, Anderson, 1991, págs. 347 - 350), permite que a escolha de uma malha particular seja feita a posteriori. Esta versatilidade, em particular, e a concepção da metodologia em geral, devem possibilitar o desenvolvimento de procedimentos aplicáveis a outros tipos de equações integro-diferenciais.

v) O método de Multhopp é o método mais difundido para a solução da Eq. (1). A sua elaboração se basea numa distribuição finita de vórtices e na expansão da circulação em séries de Fourier, cujos coeficientes são determinados após um desenvolvimento razoavelmente longo(Multhopp, 1938, 1950). A aplicação do método se faz através da solução de um sistema de equações lineares.

vi) Na passagem da Eq. (13) para a Eq. (14), admitiu-se N ímpar, o que faz com que $\bar{y}_M$ coincida com a seção central da asa. Caso se queira trabalhar com N ímpar, para a M-ésima coluna da matriz A, deve-se considerar:

$$A_{(e,M)}=L_{(e,M)} + L_{(e,M+1)}$$

CONCLUSÃO

Um método baseado no conceito de elementos finitos foi desenvolvido para a solução numérica da equação da linha de sustentação de Prantdl, adotando aproximções constantes por partes para a função circulação e o método de colocação para a ponderação do resíduo. A aplicação do método na determinação da distribuição de sustentação em uma asa retangular e em uma asa trapezoidal ilustrou sua convergência que, embora mais lenta que a do método de Multhopp, foi muito satisfatória se considerarmos a simplicidade do modelo de aproximação adotado. A versatilidade do método se mostrou um aspecto positivo quando comparado com o método de Multhopp. Enquanto no primeiro a malha de discretização pode ser definida a posteriori, no segundo ela é definida nos primeiros passos do desenvolvimento. Espera-se que a presente metodologia seja útil, não apenas para o desenvolvimento de técnicas de solução numérica de problemas de aerodinâmica, mas também para o estudo problemas de outras áres onde o fenmeno físico é descrito por equações integro-diferenciais.

REFERÊNCIAS

Anderson Jr., J. D., 1991,"Fundamentals of Aerodynamics", MaGraw-Hill, New York.

Baker, A. J., 1985, "Finite Element Computational Fluid Mechanics", McGraw-Hill, New York.

Fletcher, C. A. J., 1984, "Computational Galerkin Methods", Springer-Verlag, New York.

Landahl, M. T. e Stark, V. J. E., 1968, "Numerical Lifting-Surface Theory – Problems and Progress", AIAA *Journal*, Vol. 6, pp. 2049 –2060.

Multhopp, H., 1938, "Die Berechnung Auftriebsverteilung von Traggfügeln", *Luftfarhrtorschung* (Translation: ARC.8516), pp. 153 – 169.

Multhopp, H., 1950, "Methods for Calculating the Lift Distribution of Wings", Royal Aircraft Establishment, Farnborough, Report No. Aero. 2353.

Schlichting, H. e Truckenbrodt, E., 1979, "Aerodynamics of the Airplane", McGraw-Hill International Book Company, New York.

Abstract

A method is presented for numerical determination of wing lift distribution based on Prandtl Lifting-Line Theory and the parametrization of circulation function. By applyng the Collocation Method adopting a finite elements type discretization with piecewise constant functions, the method represent a very simple approach. Results are obtained and compared with the Multhopp Method.

ANÁLISE TEÓRICA DA INFLUÊNCIA DA PAREDE DE UM TÚNEL SOBRE A CURVA DE COEFICIENTE DE COLETA LOCAL

Carlos Daniel Ebinuma
Alexandre Testa Varallo
Departamento de Energia - Pós Graduação
UNESP - Campus de Guaratinguetá
12500-000 - Guaratinguetá - SP - Brasil

SUMÁRIO

A determinação dos limites das regiões de coleta de gotículas de água nas aeronaves durante o vôo consiste em uma importante etapa para o desenvolvimento de sistemas de proteção contra formação de gelo nas regiões dos bordos de ataque. Em geral, para esta determinação simula-se modelos reduzidos ou em tamanho real em túnel de vento. Este trabalho consistiu em analisar a influência que a parede de um túnel pode ocasionar sobre a curva de coeficiente de coleta local e nos limites de "impingement" para os perfis aerodinâmicos NACA0012 e MS-0317.

SIMBOLOGIA

c	- corda do perfil
Sl	- limite inferior de coleta
Su	- limite superior de coleta
Cp	- coeficiente de pressão
x/c	- coordenada x dividida pela corda
y/c	- coordenada y dividida pela corda
s/c	- comprimento na superfície do perfil dividida pela corda
α	- ângulo de ataque do perfil
β	- coeficiente de coleta local
$\beta_{máx}$	- coeficiente de coleta local máximo
dist	- distância entre as paredes do túnel e o eixo x do sistema de referência fixado no bordo de ataque
Δ	- diferença entre os valores obtidos no escoamento dentro do túnel com os dados no escoamento livre
U_X	- velocidade calculada em função da singularidade
U_∞	- velocidade fora da região pertubada (velocidade no infinito)

OBJETIVO

O objetivo deste trabalho foi analisar a influência que a parede de um túnel pode ocasionar sobre a curva de coeficiente de coleta local e a determinação da menor distância cuja a influência seja aceitável para ângulos de ataque iguais a 0° e 8°.

INTRODUÇÃO

Assim que o Homem começou a voar mais alto, e por um período de tempo mais prolongado, um problema à época aparentemente sem solução, deixava-o desanimado: a formação e o acúmulo de gelo nas aeronaves.

Este fenômeno acontecia todas as vezes em que uma aeronave atravessava uma massa de ar cheia de vapor d'água em condições metaestável, isto é, vapor super-resfriado. O contato deste vapor com a superfície da aeronave provoca uma troca de energia capaz de provocar seu congelamento instantâneamente ou quase instantâneo.

A formação de gelo numa aeronave pode afetar de várias maneiras suas características de vôo, sendo as principais:

•aumento do arrasto: causado pelo acúmulo de gelo de maneira irregular nos bordos de ataque e protuberâncias da fuselagem;

•diminuição da capacidade de sustentação máxima: causado pela modificação na geometria do perfil das superfícies, que geram sustentação (asa, empenagem, ...);

•diminuição da eficiência de equipamentos, por exemplo: modificação do diâmetro de entrada dos tubos de "Pitot" utilizados para a determinação da velocidade da aeronave, perda da "dirigibilidade" da aeronave devido ao acúmulo de gelo nas superfícies de controle ("flaps", leme,...) e etc;

• diminuição da visibilidade: o gelo formado no parábrisa impede parcialmente ou totalmente a visibilidade dentro da cabine de controle;

• diminuição da eficiência do sistema de propulsão: num sistema turbohélice os depósitos de gelo irregularmente distribuídos sobre as pás da hélice causa vibrações e suas distorções, causando perda de potência efetiva. Já para os casos que utilizam turbinas, o acumulo de gelo nos bordos de entrada provoca modificação na vazão de ar absorvida pelo equipamento, afetando assim a sua eficiência e dos sistemas conectados como, por exemplo, sistemas anti-gelo, sistemas de ar condicionado.

Assim, a determinação precisa das regiões onde ocorre a formação de gêlo na aeronave é fundamental para os projetos de sistemas que previnem a formação de gêlo.

Os limites de coleta são definidos como sendo os últimos pontos onde ocorre o choque das gotas sobre a superfície do perfil, e a curva de coeficiente de coleta local representa a distribuição de água coletada por um perfil aerodinâmico.

Os principais fatores que definem o limite de coleta são: o ângulo de ataque, a geometria do perfil, a velocidade do escoamento e o diâmetro das gotículas.

DESENVOLVIMENTO

A determinação teórica das curvas de coeficiente de coleta local foram feita utilizando o programa EMBRICE (1995) desenvolvido em conjunto EMBRAER/UNESP.

O EMBRICE integra numericamente a trajetória das gotículas utilizando um campo de velocidades calculado através do método dos painéis [escoamento potencial incompressível, formulação de Hess-Smith sem a correção da camada limite; o método permite o cálculo do escoamento em torno de aerofólios compostos de multi-elementos: slats, flaps,...] (1984;1991), e determina os pontos de impacto sobre o perfil.

A validação dos resultados do programa consistiu na utilização de resultados apresentados nas referências NACA TN 3839, NACA REPORT 824 e Guffond (1988).

O modelo utilizado para a simulação das forças que agem sobre a gotícula de água é baseado na 2ª lei de Newton:

$$\vec{F}_R + \vec{F}_G = m\vec{a} \qquad (1)$$

onde, $\vec{F}_R$ - força de arrasto

$\vec{F}_G$ - força gravitacional

m - massa da gotícula

$\vec{a}$ - aceleração da gotícula

Integrando duplamente no tempo a equação 1 determina-se o deslocamento da gotícula.

$$\vec{x} = \iint \frac{\vec{F}_R + \vec{F}_G}{m} dt \qquad (2)$$

A força de sustentação não foi utilizada porque a geometria adotada para representar a gotícula foi a esférica, provocando assim o seu cancelamento.

Os resultados obtidos pelo programa são:

- trajetória das gotículas;
- determinação dos limites de coleta;
- curva de coeficiente de coleta local.

Resumindo, as etapas de cálculo são:

- determinação do campo de escoamento;
- calculo das trajetórias das gotículas;
- determinação da curva de coeficiente de coleta local.

Foram utilizados nesta análise dois perfis simulando as paredes de um túnel de vento e os perfis MS-0317 e NACA 0012, mostrados nas figuras 1 e 2, respectivamente. Na figura 3 são mostrados a configuração do túnel com o perfil NACA 0012 para dois valores de α, 0° e 8°.

Também, nesta análise utiliza-se a distribuição de pressão como forma de ilustrar a influência do túnel sobre os perfis.

A partir do modelo de singularidade utilizado no método dos painéis determina-se a contribuição de cada painel no campo de velocidade e, utilizando a equação 3 abaixo, calcula-se a distribuição de pressão ao longo do perfil aerodinâmico.

$$C_P = 1 - \frac{U_X}{U_\infty} \qquad (3)$$

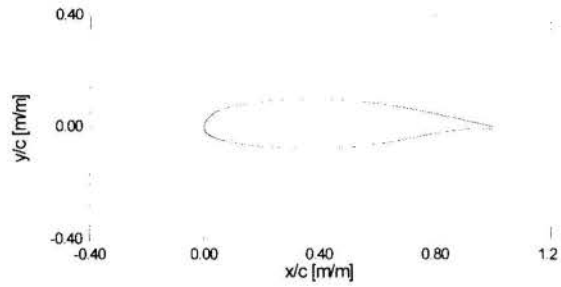


Figura 1 - Perfil MS-0317

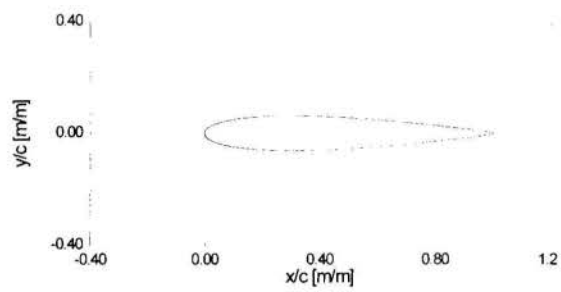
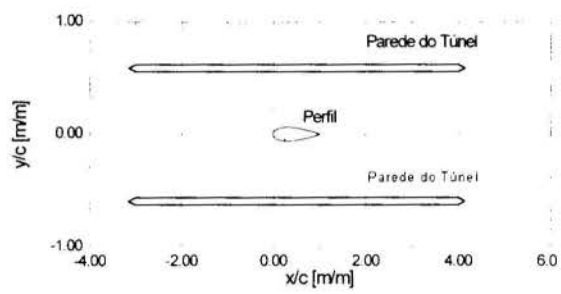
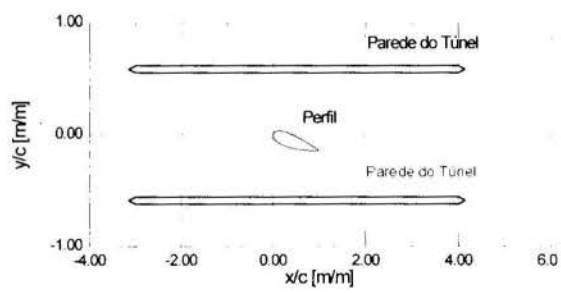


Figura 2 - Perfil NACA 0012



(a) α = 0°



(b) α = 8°

Figura 3 -Disposição dos perfis no tunel

Tabela 1 - Condições de vôo utilizadas nesta análise.

Altitude	nível do mar
Temperatura	-10 °C
Diâmetro da gotícula	20 μ m
Velocidade	250 Knot (128.87 m/s)
Ângulo de ataque	0° e 8°
Corda	1.0 m

RESULTADOS

Coma a curva de coeficiente de coleta local e distribuição ao longo da superfície dos perfis obtidos e apresentados nas figuras 4 à 11, pode-se elaborar a tabela 2 onde são mostrados os valores dos limites de coleta superior e inferior para as condições de escoamento livre e para o caso dentro do túnel, além dos valores dos coeficientes de coleta local máximo. Nesta mesma tabela, mostram-se as diferenças existentes entre as condições referenciadas anteriormente.

Assim, para o Perfil MS-0317, observando-se os resultados obtidos podemos separa-los em duas perspectivas.

A primeira corresponde aos resultados para a condição de angulo de ataque igual a 0°, figura 4. Neste caso, verifica-se que a influência da parede do túnel é mais critica na região do extradorso. Esta característica era esperada pois, este perfil não é simétrico.

Já a segunda perspectiva, consiste nos resultados para o angulo de ataque igual a 8°, figura 6. Nota-se que a influência sobre a curva de coleta aumentou provocando uma considerável instabilidade e principalmente um desvio nos limites de "impingement".

Nas figuras 5 e 7, distribuições de pressão para os angulos de ataque igual a 0° e 8°, observam-se as mesmas características relatadas acima.

Para o Perfil NACA 0012, verifica-se resultados semelhantes ao perfil MS-0317. Contudo, observa-se nas figuras 8 e 10, uma influência menor para os dois angulos de ataque.

Na tabela 2, pode-se constatar o quanto a parede de um túnel de vento influencia à medida que este se aproxima da superfície do perfil aerodinâmico.

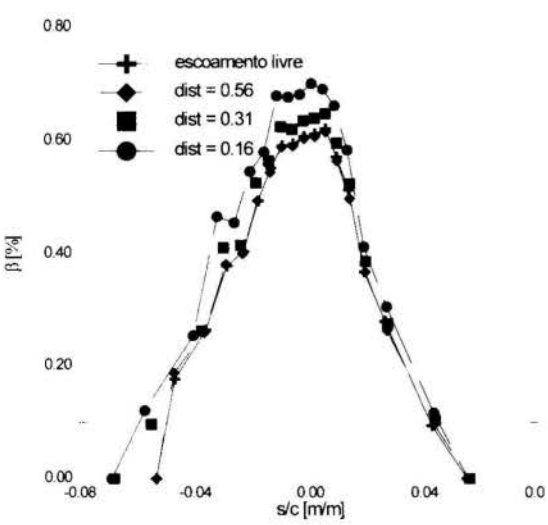
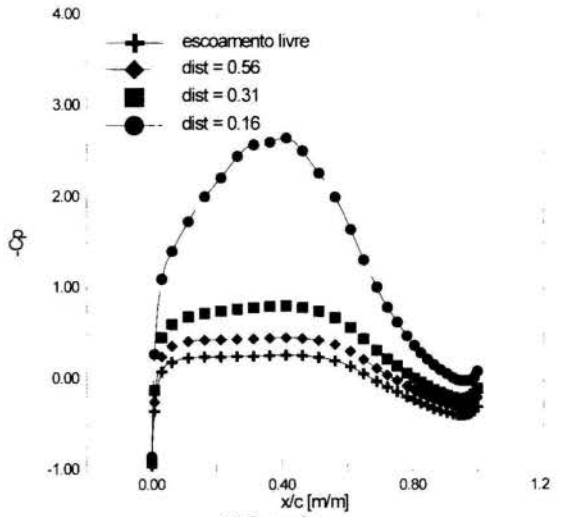
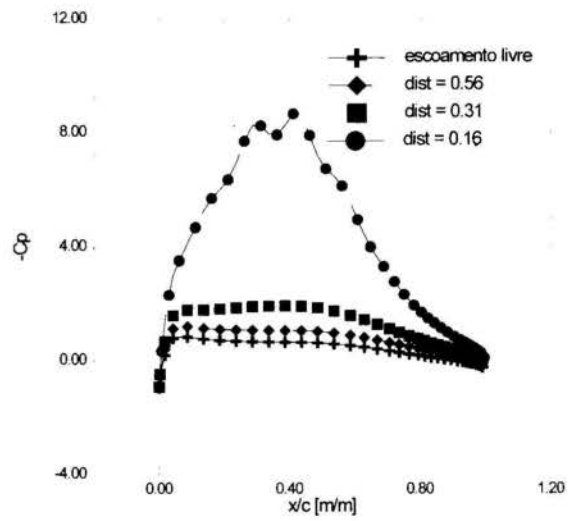


Figura 4 - Perfil MS-0317: Curva de Coeficiente de Coleta Local para α = 0°



(a) Intradorso



b) Extradorso

Figura 5 - Perfil MS-0317: Distribuição de Pressão para α = 0°

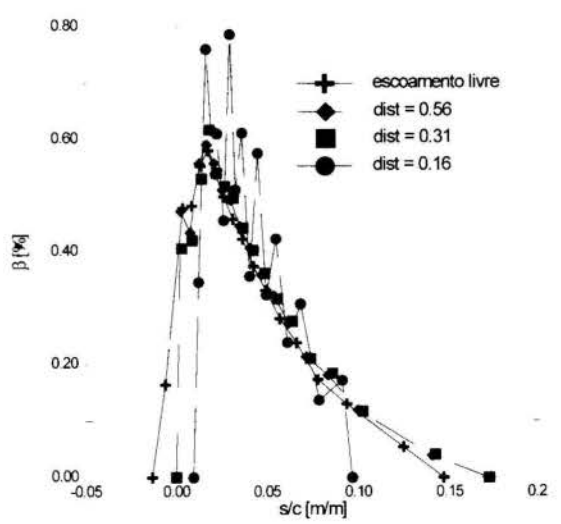
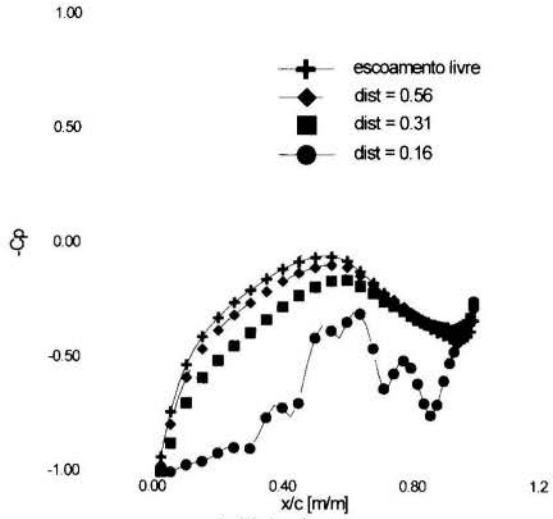
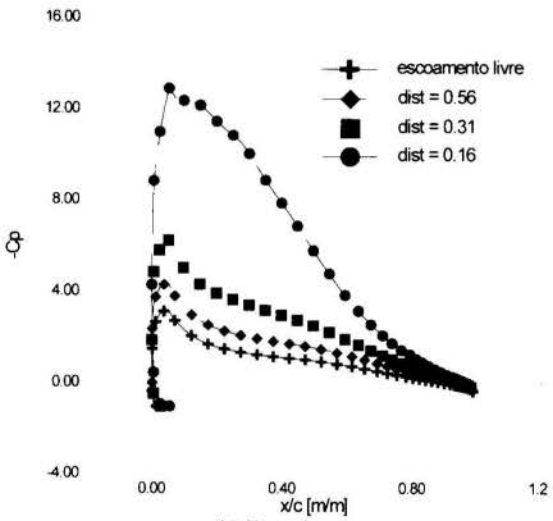


Figura 6 - Perfil MS-0317: Curva de Coeficiente de Coleta Local para α = 8°



(a) Intradorso



(b) Extradorso

Figura 7 - Perfil MS-0317: Distribuição de Pressão para $\alpha = 8°$

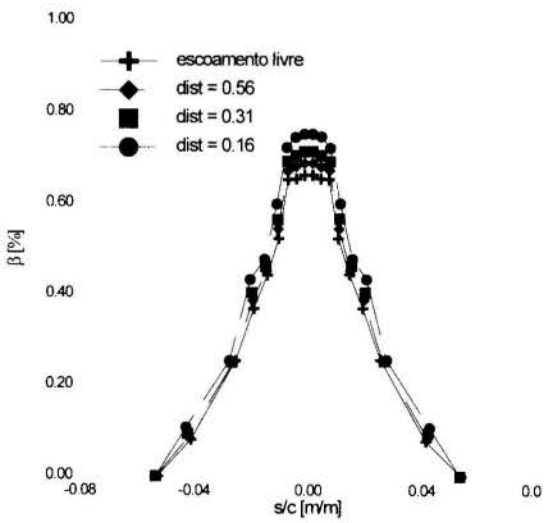
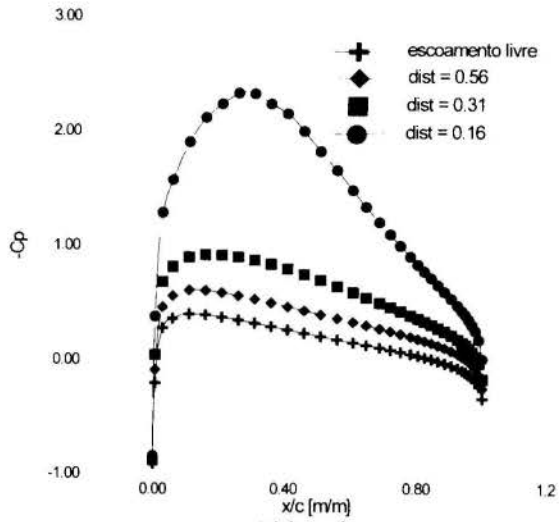
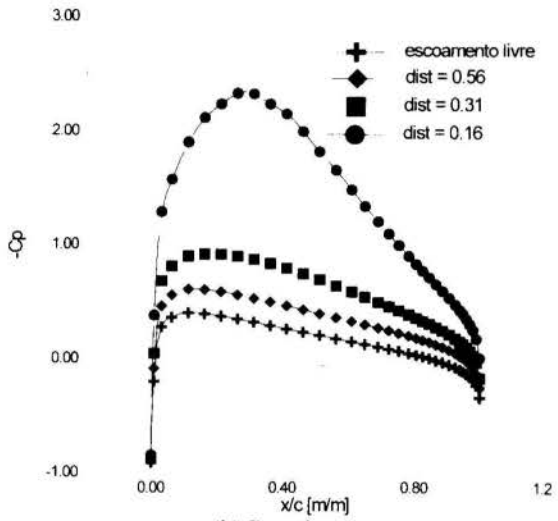


Figura 8 - Perfil NACA 0012: Curva de Coeficiente de Coleta Local para $\alpha = 0°$



(a) Intradorso



(b) Extradorso

Figura 9 - Perfil NACA 0012: Distribuição de Pressão para $\alpha = 0°$

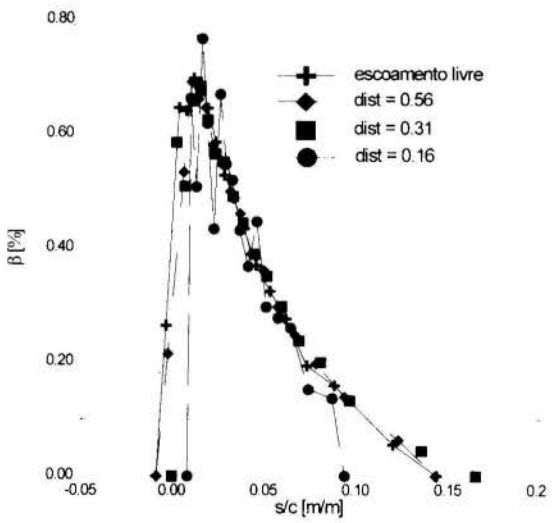
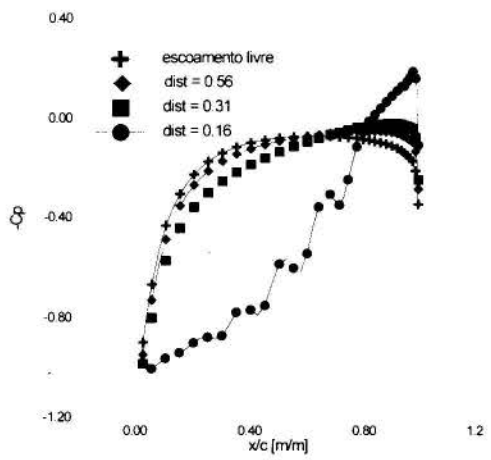


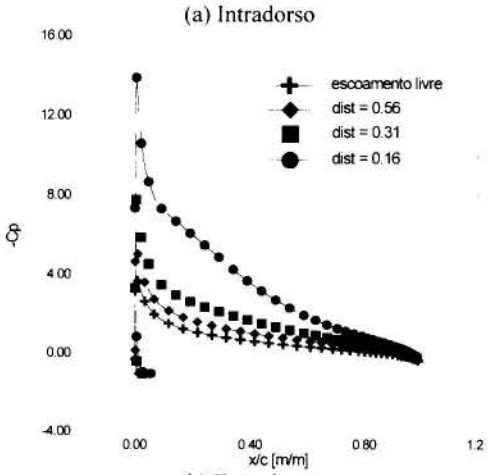
Figura 10 - Perfil NACA 0012: Curva de Coeficiente de Coleta Local para $\alpha = 8°$

Tabela 2 - Comparação dos valores dos limites de coleta no escoamento livre e para o caso com a influência do túnel

		Escoamento Livre			**Escoamento dentro do túnel**			**Δ**		
dist	***Perfil***	***Su***	***Sl***	$\beta_{máx}$	***Su***	***Sl***	$\beta_{máx}$	***Su***	***Sl***	$\beta_{máx}$
					α = 0°					
0.56	**MS - 0317**	-0.05329	0.05514	0.62157	-0.05324	0.05579	0.61586	-0.00005	0.00065	-0.00571
	NACA 0012	-0.05285	0.05388	0.66128	-0.05337	0.05382	0.68721	0.00052	-0.00006	0.02593
0.31	**MS - 0317**	-0.05329	0.05514	0.62157	-0.06790	0.05600	0.64772	0.01461	0.00086	0.02615
	NACA 0012	-0.05285	0.05388	0.66128	-0.05355	0.05353	0.71255	0.00070	-0.00035	0.05127
0.16	**MS - 0317**	-0.05329	0.05514	0.62157	-0.06873	0.05550	0.70104	0.01544	0.00036	0.07947
	NACA 0012	-0.05285	0.05388	0.66128	-0.05343	0.05356	0.75107	0.00058	-0.00032	0.08979
					α = 8°					
0.56	**MS - 0317**	-0.01330	0.14687	0.58016	0.00000	0.17123	0.59020	0.01330	0.02436	0.01004
	NACA 0012	-0.00843	0.14409	0.69793	-0.00831	0.14347	0.69133	-0.00012	-0.00062	-0.00660
0.31	**MS - 0317**	-0.01330	0.14687	0.58016	0.00003	0.17183	0.61714	-0.01333	0.02496	0.03698
	NACA 0012	-0.00843	0.14409	0.69793	0.00002	0.16517	0.67651	-0.00845	0.02108	-0.02142
0.16	**MS - 0317**	-0.01330	0.14687	0.58016	0.00950	0.09684	0.78646	-0.02280	-0.05003	0.20630
	NACA 0012	-0.00843	0.14409	0.69793	0.00851	0.09418	0.76701	-0.01694	-0.04991	0.06908



(a) Intradorso



(b) Extradorso

Figura 11 - Perfil NACA 0012: Distribuição de Pressão para α = 8°

CONCLUSÕES

Inicialmente conclui-se que, dependendo da distância da parede do túnel com relação ao perfil, os resultados podem ser considerados satisfatórios se o objetivo do ensaio for determinar a curva de coeficiente de coleta local.

Entretanto, é importante salientar que se o objetivo do ensaio, for analisar por exemplo, a eficiência de um sistema térmico anti-gelo, a pertubação da distribuição de pressão torna-se muito importante pois, ocasiona uma mudança na taxa convectiva do fluxo de calor utilizado para evitar o acumulo de gelo.

Portanto, conclui-se que a distância das paredes do túnel com relação ao perfil (dist) deverá ser igual ou superior a 0.31 quando o objetivo do ensaio for a determinação da curva de coeficiente de coleta local e superior a 0.31 quando a distribuição de pressão for um fator importante do ensaio, isto é, quando estiver ensaiando um sistema térmico anti-gelo.

REFERÊNCIAS

Varallo, Alexandre T., 1995, "Relatório e Manual do Programa EMBRICE".,EMBRAER - Empresa Brasileira de Aeronáutica S/A.

Guffond,D. e Brunet,L., 1988, " Validation Du Programe Bidimensionnel de Captation" , ONERA - França.

Moran, Jack, 1984, "An Introduction to Theoretical and Computational Aerodynamics", John Wiley & Sons.

Katz, Joseph e Plotkin, Allen, 1991, "Low - Speed Aerodynamics (From Wing Theory to Panel Methods)", Mc Graw Hill, Inc.

Abbott, Ira H., Doenhoff, Albert E. Von e Stivers, Louis S. Jr., " Naca Report 824".

Gelder, T. F., Smymers, Willian H. e Glahn, Uwe Von, "Experimental Droplet Impingement on Several Two-dimensinal Airfoils With Thickness Rations of 6 to 16 Percent", Naca TN 3839.

SUMMARY

The determination of the limits of water collection consist in a steps to development anti-icing systems. This work is intended to analyse the influence of wind tunnel on the local collection efficiency curve and the impingement limits to some aerodynamics profile knowns.

ABCM

ANÁLISE NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS EM GRADES LINEARES DE PERFIS PARA VÁRIOS REGIMES DE VELOCIDADE

Edson Basso e João L.F. Azevedo
Instituto Tecnológico de Aeronáutica
Centro Técnico Aeroespacial
12228-901 - S.J. Campos - S.P. - Brasil

SUMÁRIO

O presente trabalho tem por objetivo a avaliação numérica dos parâmetros aerodinâmicos de grades de perfis. Escoamentos são simulados utilizando-se um método de diferenças finitas aplicado às equações de Euler em 2D, em um contexto de malhas estruturadas. O algoritmo proposto baseia-se no esquema de Beam & Warming, alterado para simulação de escoamentos independentemente do regime de velocidade considerado. Resultados são apresentados para escoamentos subsônicos, transônicos e supersônicos, e estes apresentam boa concordância com os dados disponíveis na literatura.

INTRODUÇÃO

O uso de métodos numéricos para prever o fluxo através de grades de perfis vem crescendo, impelido pelos avanços em microeletrônica e programas para computadores. Os campos de escoamentos de interesse são complexos e, muitas vezes, utilizam-se programas baseados em uma formulação de Euler que, embora não sendo capazes de capturar certos aspectos do fluxo, têm um custo computacional substantivamente menor. Por outro lado, claramente o objetivo a longo prazo de um trabalho de desenvolvimento, como o aqui reportado, deve ser o de passar a realizar tais simulações com uma formulação baseada nas equações de Navier-Stokes, uma vez que alguns fenômenos físicos de interesse só serão capturados com uma formulação viscosa.

A motivação fundamental para se estudar grades lineares de perfis consiste no desenvolvimento de ferramentas numéricas que permitam a análise do desempenho de compressores e/ou turbinas axiais. O escoamento em tais equipamentos é, claramente, tridimensional. Entretanto, dentro do contexto do desenvolvimento anteriormente mencionado, o primeiro passo do trabalho consiste em analisar uma série infinita de perfis bidimensionais, usualmente denominada uma grade linear de perfis na literatura técnica específica, que representam uma idealização do estator, ou do rotor, de um estágio do compressor ou da turbina. A preocupação básica no contexto do presente trabalho reside em compressores e/ou turbinas aeronáuticas. Desta forma, as perdas existentes na grade tipicamente podem ser creditadas a efeitos de viscosidade e à presença de ondas de choque no escoamento. Estes últimos efeitos adquirem uma importância fundamental uma vez que, em grande parte dos casos práticos de interesse, a grade está sujeita a escoamentos transônicos.

No presente caso, escoamentos são simulados utilizando-se as equações de Euler em 2D, as quais são discretizadas com base em um método de diferenças finitas. O método específico utilizado aqui foi desenvolvido originalmente por Martins (1994). Este se baseia em obter um esquema que seja independente do regime de velocidade através de uma escolha apropriada de variáveis dependentes, apesar de se manter a formulação escrita na forma conservativa usual dos métodos derivados para problemas de escoamentos compressíveis (ver Azevedo e Martins, 1993, Martins e Azevedo, 1993, e Martins, 1994, para maiores detalhes). O algoritmo utiliza um esquema implícito de fatoração aproximada em forma delta, com o método de Euler implícito para marcha no tempo. O algoritmo é similar ao tradicional esquema de Beam & Warming (1978), com as mudanças necessárias para que a pressão ocupe o lugar da densidade nas equações. São testados três casos, com o intuito de se cobrir a faixa de utilização dos atuais equipamentos simulados através de grades de perfis. O fluido foi tratado como gás perfeito, sem reação química. Para convergência do método proposto, foi implementado um modelo de dissipação artificial não linear, o qual se mostrou eficaz na redução de oscilações. Condições de contorno nas fronteiras de entrada e saída foram implementadas através de relações características (Azevedo, 1990 e Azevedo et al., 1992).

FORMULAÇÃO TEÓRICA

As equações de Euler em 2D podem ser escritas em forma de lei de conservação, para um sistema de coordenadas curvilíneas generalizadas como (Azevedo, 1990):

$$\frac{\partial \overline{Q}}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{E}}{\partial \xi} + \frac{\partial \overline{F}}{\partial \eta} = 0 \, . \qquad (1)$$

Aqui, $\overline{Q}$ representa o vetor de variáveis conservadas e $\overline{E}$ e $\overline{F}$ são os vetores de fluxo não viscosos, dados por:

$$\overline{Q} = J^{-1} \left[\begin{array}{cccc} \rho & \rho u & \rho v & e \end{array} \right]^T , \qquad (2)$$

$$\overline{E} = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \rho U \\ \rho u U + p\xi_x \\ \rho v U + p\xi_y \\ (e+p)\,U - p\xi_t \end{array} \right\} , \qquad (3)$$

$$\overline{F} = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \rho V \\ \rho u V + p\eta_x \\ \rho v V + p\eta_y \\ (e+p)\,V - p\eta_t \end{array} \right\} .$$

Nas equações acima, ρ é a densidade, u e v são componentes cartesianas de velocidade, e e é a energia total por unidade de volume. A pressão p é obtida da equação de estado para gases perfeitos. Embora a forma usual da equação envolva a densidade, ρ, e a temperatura, T, é conveniente se escrever esta equação no caso presente como função da energia interna específica, e_i. Portanto,

$$p = (\gamma - 1)\,\rho e_i \ , \qquad (4)$$

onde γ é a razão de calores específicos para gases perfeitos. Vale ressaltar também que, caso seja necessário, a temperatura pode ser escrita em função da energia interna como:

$$T = (\gamma - 1) e_i / R \ , \qquad (5)$$

onde R é a constante do gás. A energia total por unidade de volume é definida como:

$$e = \rho \left[e_i + \frac{1}{2}\left(u^2 + v^2\right) \right] , \qquad (6)$$

o que fecha o sistema. As componentes contravariantes de velocidade são escritas como:

$$\begin{array}{l} U = \xi_t + \xi_x u + \xi_y v \ , \\ V = \eta_t + \eta_x u + \eta_y v \ , \end{array} \qquad (7)$$

e os termos de métrica são expressos por:

$$\begin{array}{ll} \xi_x = J y_\eta & \eta_x = -J y_\xi \\ \xi_y = -J x_\eta & \eta_y = J x_\xi \\ \xi_t = -x_\tau \xi_x - y_\tau \xi_y & \eta_t = -x_\tau \eta_x - y_\tau \eta_y \end{array} \qquad (8)$$

Para que o algoritmo possibilite também o tratamento de escoamentos incompressíveis, propõe-se aqui uma mudança de variáveis dependentes em que a pressão substitui a densidade como variável principal da equação da continuidade (Chen & Pletcher, 1991). Assim, as equações de Euler assumem a forma:

$$\frac{\partial Q(q)}{\partial \tau} + \frac{\partial E(q)}{\partial \xi} + \frac{\partial F(q)}{\partial \eta} = 0 \ , \qquad (9)$$

onde:

$$q = \left\{ \begin{array}{cccc} p & u & v & T \end{array} \right\}^T . \qquad (10)$$

O novo vetor de variáveis conservadas fica escrito como:

$$Q = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \frac{p}{T} \\ \frac{pu}{T} \\ \frac{pv}{T} \\ \frac{p}{(\gamma-1)} + \frac{p}{2RT}\left(u^2+v^2\right) \end{array} \right\} , \qquad (11)$$

e o vetor de fluxo E, como exemplo, fica:

$$E = J^{-1} \left\{ \begin{array}{c} \frac{pU}{T} \\ \frac{puU}{T} + Rp\xi_x \\ \frac{pvU}{T} + Rp\xi_y \\ \left[\frac{\gamma p}{(\gamma-1)} + \frac{p}{2RT}\left(u^2+v^2\right)\right] U - p\xi_t \end{array} \right\} . \qquad (12)$$

FORMULAÇÃO NUMÉRICA

Para a marcha no tempo, será utilizado o seguinte esquema:

$$Q^{n+1} = Q^n + \Delta t \left(\frac{\partial Q}{\partial \tau} \right)^{n+1} + \Delta t O(\Delta t) \ , \qquad (13)$$

conhecido como método de Euler implícito. Ao se inserir a Eq.(9) nesta última, obtém-se:

$$Q^{n+1} = Q^n - \Delta t \left(\frac{\partial E}{\partial \xi} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \right)^{n+1} + \Delta t O(\Delta t) \ . \qquad (14)$$

Fazendo-se uma expansão local em série de Taylor dos termos não lineares em torno de q^n, substituindo-se o resultado na Eq.(14), e aplicando-se o procedimento de fatoração aproximada ao lado esquerdo do algoritmo, chega-se a:

$$\left[I + \Delta t \left(D^n\right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi} A^n \right] \left[I + \Delta t \left(D^n\right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \eta} B^n \right] \Delta q^n =$$

$$-\Delta t \left(D^n\right)^{-1} \left(\frac{\partial E^n}{\partial \xi} + \frac{\partial F^n}{\partial \eta} \right) + O(\Delta t) \ , \qquad (15)$$

onde A, B e D são matrizes jacobianas de fluxo, cuja definição pode ser encontrada em Martins (1994). Pode-se reescrever a expressão acima em forma de operador como:

$$L_\xi L_\eta \Delta q^n = \left(D^n\right)^{-1} \left(R_\xi + R_\eta\right) \ . \qquad (16)$$

Para o problema de grades de aerofólios, foi gerada uma malha computacional, a qual apresenta simetria na direção η, à montante e à jusante do perfil, fazendo-se com que o operador L_η dê origem a uma matriz tridiagonal periódica, como exemplificado abaixo para uma malha com $\underline{n}$ linhas na direção η:

$$\left[\begin{array}{cccc} I & hD_1^{-1}B_2 & 0\cdots 0 & -hD_1^{-1}B_{n-1} \\ -hD_2^{-1}B_1 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & 0 \\ 0 & & & hD_{n-2}^{-1}B_{n-1} \\ hD_{n-1}^{-1}B_1 & 0\cdots 0 & -hD_{n-1}^{-1}B_{n-2} & I \end{array} \right]$$

Na definição dos operadores utilizados no algoritmo já foram incluídos os termos de dissipação artificial não linear necessários à estabilidade numérica (Pulliam, 1986).

CONDICÕES INICIAIS E DE CONTORNO

Duas condições iniciais diferentes são necessárias. Para os casos subsônico e transônico, todo o domínio computacional tem como valores iniciais de propriedades as de estagnação, sendo somente as propriedades dos pontos na saída da malha alterados de forma a reproduzir uma condição física desejável, ou seja, o valor da pressão para aqueles pontos são divididos por um valor ditado pelo usuário, procedimento este que cria um gradiente de pressão na direção desejada, dando início ao escoamento.

Para o caso supersônico, esta condição inicial acima não é possível de ser implementada, pois se houvesse a aceleração do escoamento, fatalmente teria-se um bloqueio do canal de passagem entre os perfis, conhecido como "entupimento", o que impediria que este continuasse a acelerar. Isto se dá porque, dessa forma, o escoamento aceleraria progressivamente até atingir o regime sônico na garganta, dando origem ao fenômeno. Por isso, neste tipo de simulação, começa-se com um regime supersônico para todos os pontos do domínio.

As condições de contorno da saída e entrada são ambas tratadas através de relações características unidimensionais, as quais se enquadram no conceito de não reflexivas.

Nas regiões onde se encontram os aerofólios, estas foram tratadas fazendo-se com que o vetor velocidade fosse paralelo à superfície, hipótese básica em se tratando de uma formulação não viscosa. Para o cálculo da pressão, admite-se uma estrapolação para a pressão através do ponto adjacente à fronteira.

Finalmente, nas regiões da malha onde se observa a periodicidade, imediatamente à montante e a jusante dos perfis, implementou-se um cálculo de uma matriz tridiagonal periódica, o qual se mostrou eficaz no transporte de informações de um lado para outro da malha. Esta matriz se origina do operador L_η, que, ao atuar sobre uma linha ξ constante, o faz devido a um ponto de simetria na malha, ou seja, o ponto com j=1 têm as mesmas propriedades do ponto $j=j_{máx.}$.

RESULTADOS

O primeiro conjunto de testes realizados considerou uma grade de aerofólios na qual a condição do escoamento na seção de entrada do domínio de cálculo é subsônica. A configuração de grade utilizada é aquela descrita por Sanz (1984), e empregou-se uma malha computacional de 118 pontos na direção ξ, ou direção longitudinal, e 41 pontos na direção η, ou direção transversal. No presente conjunto de testes, o número de Mach na entráda do domínio é de aproximadamente 0,34, e o ângulo de entrada do escoamento é de 36,0°. Deve-se salientar que o número de Mach de entrada não é uma condição de contorno fixada para uma entrada subsônica, uma vez que isto levaria a um problema matematicamente mal posto e a consequente divergência do método numérico. Antes, o número de Mach de entrada é um resultado do cálculo, e o valor no presente caso está sendo informado acima para que o leitor possa ter uma idéia mais precisa da condição de escoamento aqui considerada. Além disso, a configuração utilizada admite uma razão espaçamento/corda de 0,566, e uma solidicidade axial de 1,497. A Fig. 1 mostra uma visualização do escoamento após a convergência da solução.

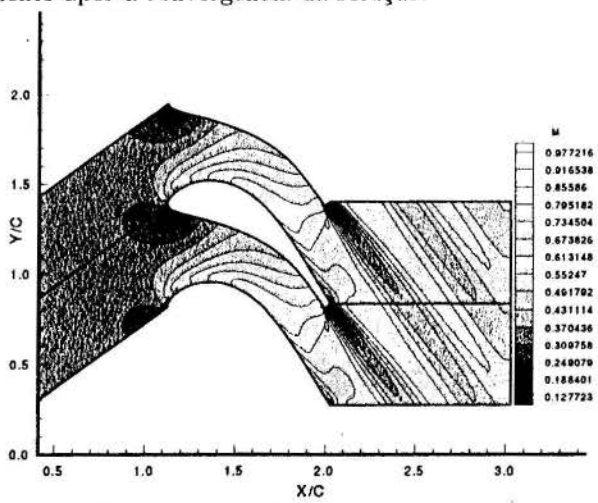


Fig. 1 - Escoamento subsônico em grade usada por Sanz (1984).

Considerando-se que a configuração de interesse no caso é uma geometria típica de turbina, fica claro da Fig. 1 que os aspectos fundamentais do escoamento estão sendo adequadamente reproduzidos pela simulação numérica. Em particular, observa-se a aceleração do escoamento através da grade, que é o comportamento esperado no caso.

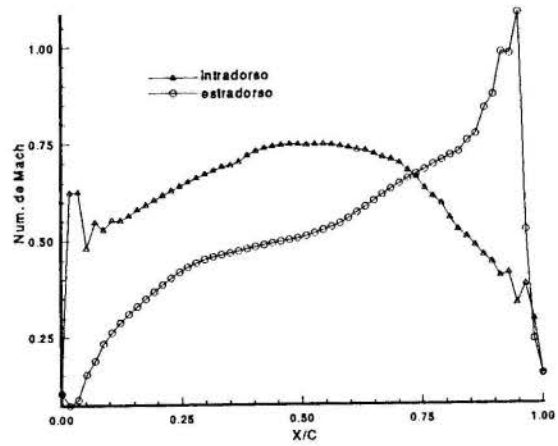


Fig. 2 - Número de Mach sobre o aerofólio para o caso subsônico.

Os resultados de simulação para o caso em que o escoamento na grade é supersônico são mostrados nas Figs. 3 e 4. A configuração específica de grade utilizada neste caso é descrita em AGARD (1990).

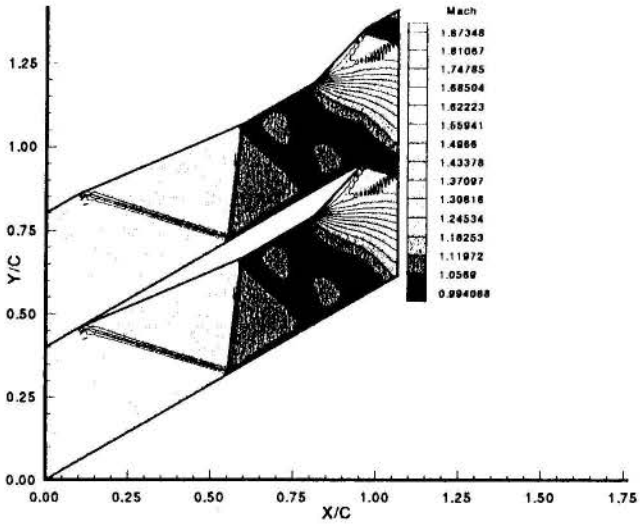


Fig. 3 - Escoamento supersônico com malha 153x41.

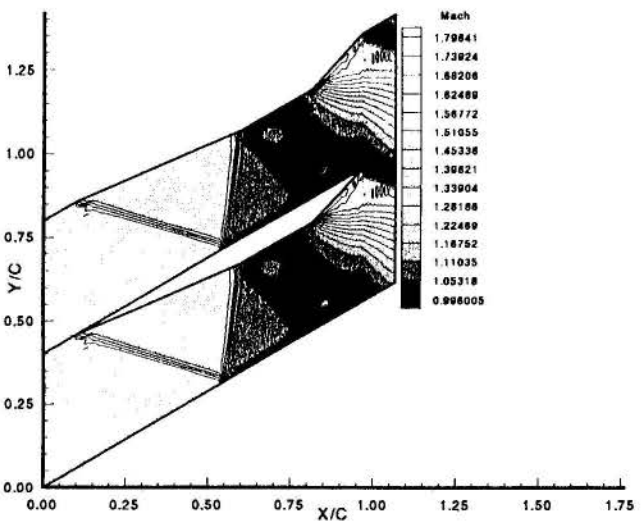


Fig. 4 - Escoamento supersônico com malha 87x31.

Pelas figuras, é possível perceber a melhoria na captura do choque e suas reflexões com o refinamento da malha. O mesmo não ocorre com o leque de expansão, tendo este oscilações. A Fig. 5 traz um confronto entre o resultado analítico e os numéricos.

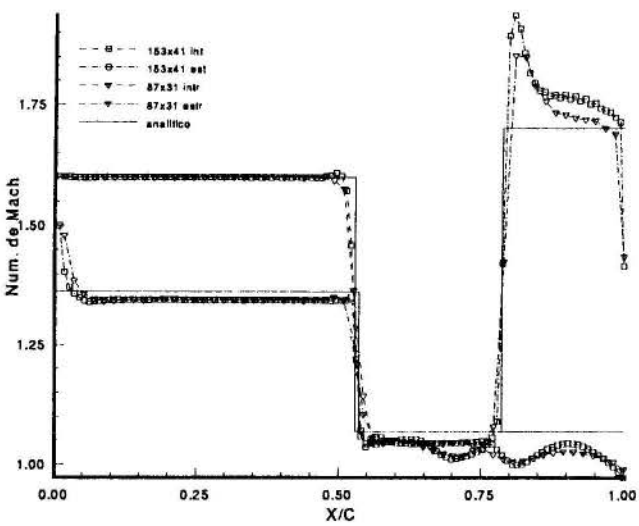


Fig. 5 - Resultados numéricos e analítico para escoamento supersônico.

Pela figura, podemos ver que o resultado para o intradorso do perfil se mostra bastante próximo do esperado, a menos da região do bordo de fuga, onde oscilações existem decorrentes da falta de resolução do leque de expansão. Isto não é um demérito do método, já que estes fenômenos são de difícil captura. Já o estradorso se mostra bastante próximo do esperado, com oscilações próximas do bordo de fuga decorrentes da reflexão do choque e influência da expansão acima, pois a solução analítica também apresenta simplificações, devendo este ser corroborado com um método de alta resolução, tais como TVD's (Harten, 1983). A Fig. 6 mostra a simulação de um caso com escoamento de entrada com Mach $\cong 0{,}8$, sobre uma grade de perfis DCA (Oldham, 1965), com arqueamento de 27,6°, espessura de 0,05, razão espaçamento/corda de 1,0, ângulo de entrada do escoamento de 30,0°, sem arredondamento dos bordos de ataque e fuga, o qual forneceu sobre a grade descrita, uma configuração de escoamento transônico.

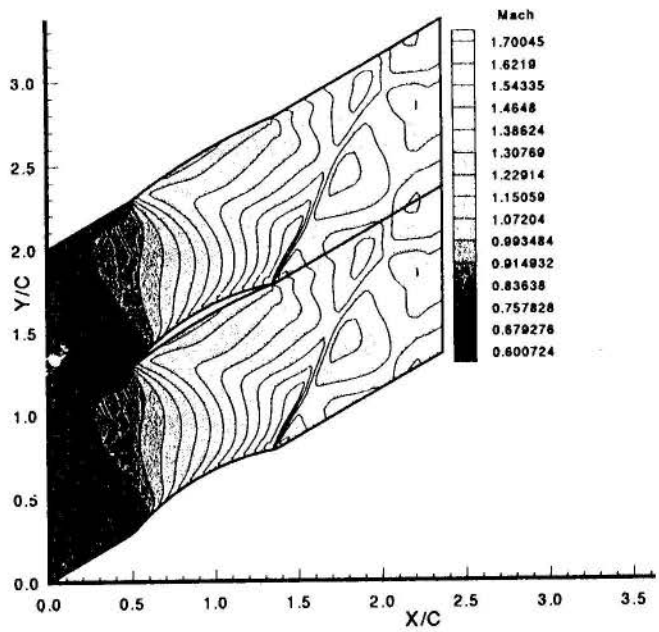


Fig. 6 - Escoamento transônico em grade DCA.

Pela visualização, podemos constatar a aceleração do escoamento até o bloqueio do canal, o qual se faz segundo a teoria, e o aparecimento de um choque na região do bordo de fuga.

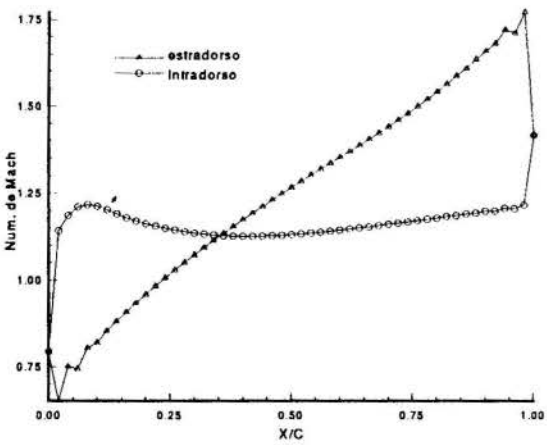


Fig. 7 - Número de Mach sobre aerofólio DCA.

Pela Fig. 7, notamos a presença de oscilações próximas dos bordos de ataque e fuga, já que a malha utilizada não tinha pontos suficientes nestas regiões. Um exemplo de malha computacional utilizada no caso subsônico também é apresentada a título de ilustração na Fig 8.

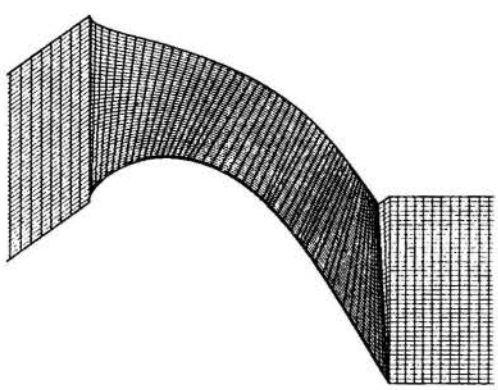


Fig. 8 - Detalhe de malha computacional sobre grade tipo Sanz.

CONCLUSÕES

Pelos resultados apresentados, concluímos que o método se mostrou bastante eficaz na captura dos diversos fenômenos envolvidos no escoamento através de grades de perfis. Os resultados foram obtidos dentro de um tempo de cálculo bastante razoável, tendo-se utilizado para isto uma estação de trabalho IBM - RISC 6000. A convergência numérica também se mostrou muito boa.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi parcialmente financiado pela Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES. Os autores também agradecem o suporte parcial do CNPq através do Projeto Integrado identificado como Proceso número 530109/93-0.

REFERÊNCIAS

Azevedo, J.L.F., 1990, "Euler Solution of Transonic Nozzle Flows", *Anais do III Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, Itapema, S.C., Vol. I, pp. 243-248.

Azevedo, J.L.F., Fico, N.G.C.R., Jr., Ortega, M.A., and Luna, G.C., 1992, "Nozzle Flow Computations Usings the Euler Equations", ICAS Paper No. 92-4.1.2, Proceedings of the 18th Congress of the International Council of the Aeronautical Sciences, Beijing, P.R. of China, Vol. I, pp. 97-107.

Beam, R.M., and Warming, R.F., 1978, "An Implicit Factored Scheme for Compressible Navier-Stokes Equations", *AIAA Journal*, Vol. 16, No.4, pp. 393-402.

Chen, K.H., and Pletcher, R.H., 1991, "Primitive Variable, Strongly Implicit Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds", *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 8, pp. 1241-1249.

Harten, A., 1983, "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws", *Journal of Computational Physics*, Vol. 49, pp. 357-393.

Martins, R.J., 1994, "Um Método de Diferenças Finitas para Simulação de Escoamentos em Qualquer Regime de Velocidade", Tese de Mestrado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP.

Pulliam, T.H., 1986, "Artificial Dissipation Models for the Euler Equations", *AIAA Journal*, Vol. 24, No. 12, pp. 1931-1940.

Sanz, J.M., 1984, "Improved Design of Subcritical and Supercritical Cascades Using Complex Characteristics and Bondary-Layer Correction", *AIAA Journal*, Vol. 22, No. 7, pp. 1302-1310.

Hirsch, Ch., Denton, J.D., and Meauzé, G., 1990, "Test Cases for Computation of Internal Flows in Aero Engine Components", Advisory Report, Propulsion and Energetics Panel Working Group 18, AGARD, No. 275, pp. 22-23.

Oldham, R.K., 1965, "Some Design Data for Double Circular Arc Compressor Blading", N.G.T.E. Note, No. NT589.

ABSTRACT

The present work has the objective of numerically evaluating the aerodynamic parameters of cascades. Flows are simulated using a finite difference method applied to the 2-D Euler equations. All computations are performed in a structured mesh context. The algorithm implemented is based on the Beam & Warming implicit approximate factorization scheme, which has been modified by the research group in order to be capable of simulating flows regardless of the speed regime considered. Results are presented for subsonic, transonic and supersonic flows. These results are in good agreement with the data available in the literature.

ABCM

VLS - AERODINÂMICA DE DECOLAGEM

Paulo Moraes Jr.
Divisão de Sistemas Espaciais
CTA/Instituto de Aeronáutica e Espaço
12228-904 - São José dos Campos - SP - Brasil

RESUMO

No presente trabalho são apresentadas as características aerodinâmicas do VLS durante a fase de decolagem. No estudo é feita uma análise da aerodinâmica da configuração do veículo sobre a mesa de lançamento, esta sujeita ao vento superficial. Nas análises, fundamentadas em resultados de ensaios em túnel de vento, são consideradas diferentes intensidades e direções de vento. Os resultados compreendem todas as características aerodinâmicas estáticas pertinentes às fases de decolagem e dos instantes de vôo vertical do veículo.

INTRODUÇÃO

A fase de decolagem do Veículo Lançador de Satélites brasileiro (VLS) pode ser considerada como uma das mais críticas do envelope de operação do veículo, em função de fatores tais como:

.. geometria complexa do veículo sobre a mesa de lançamento com defletores de chama,

.. ação do vento sobre o veículo, com diferentes intensidades e azimute e

.. acendimento simultâneo dos quatro motores do primeiro estágio.

Para uma completa descrição da dinâmica de decolagem do veículo, faz-se assim necessário o conhecimento prévio e preciso das características aerodinâmicas estáticas, na forma de coeficientes de forças e de momentos.

Em função da complexidade da configuração do veículo sobre a mesa de lançamento, bem como dos perfis, intensidades e direções do vento à serem considerados, torna-se necessário recorrer a realização de ensaios em túnel de vento (de baixa velocidade) para obtenção dos coeficientes aerodinâmicos. Estimativas teóricas não encontram neste caso boa aplicabilidade em função do exposto anteriormente.

Assim, uma série de ensaios aerodinâmicos foram realizados no túnel de vento do Centro Técnico Aeroespacial (Laboratório de Ensaios Aerodinâmicos), cujos resultados, após uma criteriosa análise, foram utilizados nos estudos e análises contidos no presente trabalho.

É portanto conteúdo do presente trabalho uma descrição detalhada da Aerodinâmica de Decolagem do VLS. O trabalho abrange todos os aspectos que dizem respeito a tal evento e resume, informações globais de interesse do Projeto.

SIMBOLOGIA

C_Z	coeficiente de força transversal
C_l	coeficiente de momento de rolamento
Lref	comprimento de referência [m]
PHI, φ	direção do vento [graus]
Sref	área de referência [m^2]
TU	torre de umbilicais
V, V_{vento}	velocidade do vento [m/s]
UTd	distância entre torre de umbilicais e veículo [m]
Xcp/L	posição relativa do centro de pressão, L=Lref

CONFIGURAÇÃO DE DECOLAGEM

A configuração de decolagem é constituída pelo veículo, em sua configuração de vôo, pela mesa de lançamento, com defletores de chama, e pela torre de umbilicais, conforme mostrado de forma simplificada na Figura 1.

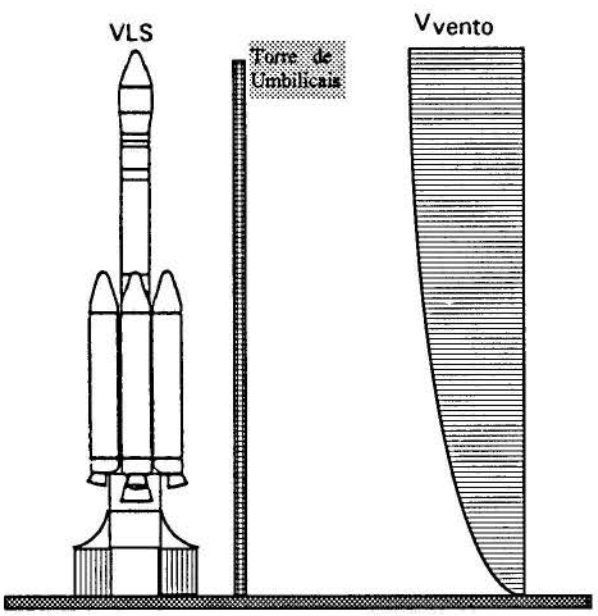


Figura 1 - VLS/Configuração de Decolagem

ENSAIOS EM TÚNEL DE VENTO

Os ensaios aerodinâmicos de simulação das condições de decolagem foram realizados no Túnel de Vento do Centro Técnico Aeroespacial / Laboratório de Ensaios Aerodinâmicos

(Moraes e Neto, 1988), com maquete do veículo e da mesa de lançamento em escala 1:15. Também a torre de umbilicais foi reproduzida nos ensaios, conforme mostrado esquematicamente na Figura 2.

Foram ensaiadas as configurações designadas por:

VC+ET : Veículo sobre a mesa de lançamento com presença da torre de umbilicais ;

VC-ET : Veículo sobre a mesa de lançamento sem a presença da torre de umbilicais

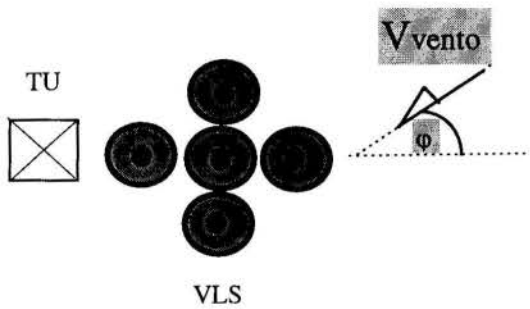


Figura 2 - VLS/ Ensaios Aerodinâmicos de Decolagem

Nos ensaios foi utilizada uma balança externa de quatro componentes, obtendo-se assim três forças (axial, lateral e transversal) e um momento (momento de rolamento).

RESULTADOS

A seguir são apresentados, em gráficos e tabelas, e comentados, os resultados obtidos nos ensaios em túnel de vento. Os valores apresentados foram analisados e posteriormente corrigidos para as condições reais de decolagem, as quais em parte não puderam ser devidamente simuladas. Resultados finais para utilização nas análises da dinâmica de decolagem e de controle de atitude do veículo são apresentados ao final do trabalho.

INFLUÊNCIA DA VELOCIDADE DO VENTO

Visto não ter sido possível simular experimentalmente as velocidades de vento preponderantes no local de lançamento, $V \leq 10$ m/s, foram feitos ensaios para três distintas velocidades: 31.0, 36.0 e 43.0 m/s, com o objetivo de determinar a influência desta sobre os coeficientes aerodinâmicos de interesse.

Os coeficientes aerodinâmicos de maior importância, para análise da dinâmica e de controle de atitude do veículo, na situação do veículo sobre a mesa de lançamento, são:

.. coeficiente de força transversal C_Z,

.. coeficiente de momento de rolamento C_l, e

.. posição do centro de pressão (de atuação de C_Z) Xcp/L.

Os gráficos seguintes, Figuras 3 a 5, mostram que a velocidade do vento não exerce influência considerável sobre C_Z, C_l e Xcp/L. Portanto é válido admitir que estes coeficientes mantenham seus valores para velocidades de vento menores. Assim sendo, todas as análises posteriores, visando o fornecimento de informações para as simulações da dinâmica e de controle de atitude do veículo, foram feitas para uma velocidade de vento igual a 10 m/s, que é a velocidade máxima permissível de lançamento.

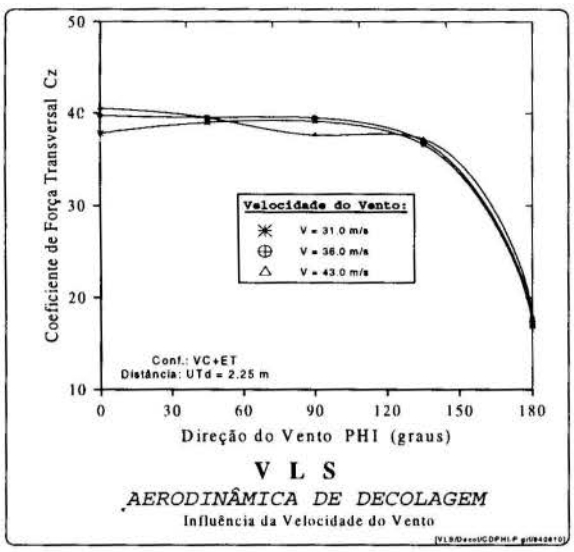


Figura 3 - Influência da Velocidade do Vento sobre Cz

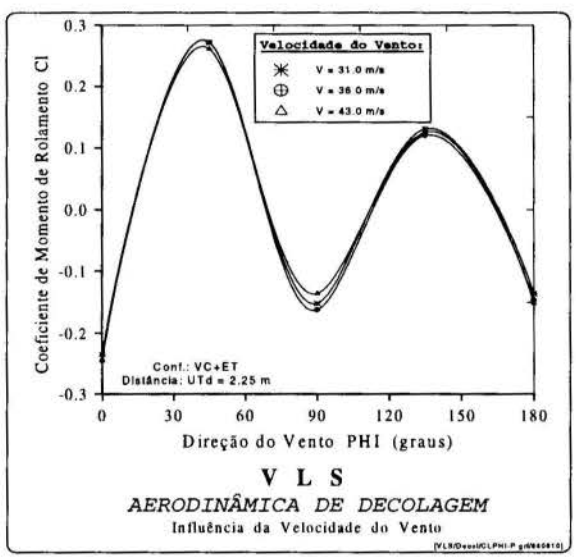


Figura 4 - Influência da Velocidade do Vento sobre Cl

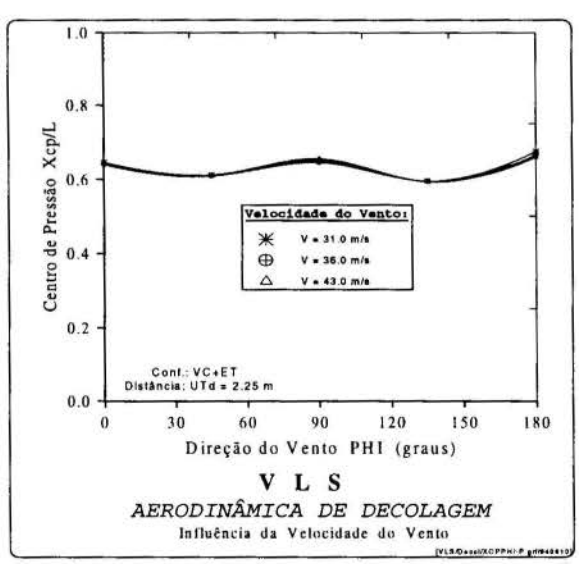


Figura 5 - Influência da Velocidade do Vento sobre Xcp/L

INFLUÊNCIA DA DIREÇÃO DO VENTO

Afim de determinar a influência da direção do vento (azimute) sobre os diversos coeficientes, esta é variada em 180 graus, primeiramente para a condição sem tôrre de umbilicais (Conf. VC-ET), Figura 6 .

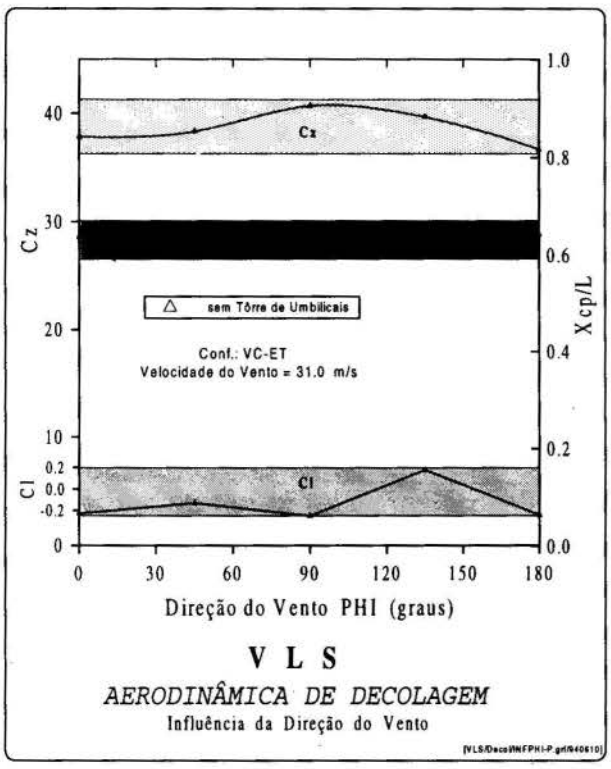


Figura 6 - Influência da direção do vento

Observa-se desta figura que as variações dos coeficientes encontram-se dentro de uma faixa de imprecisão de medição ou mesmo de variações de velocidade do escoamento ou grau de turbulência do mesmo na seção de ensaios do túnel de vento. Ocorre também que o escoamento em volta do veículo favorece a formação de vórtices e o desprendimento destes, sendo este por vêzes assimétrico (NASA, 1965). Isto explica a variação dos valores dos coeficientes para situações de simetria da configuração (vide Cz para $\phi = 0°$, 90° e 180° !). Variações mais acentuadas, para intervalos de aprox. 45°, devem-se a diferenças da geometria (face) do veículo exposta ao vento.

Na figura seguinte, Figura 7, tem-se a influência da direção do vento, com a presença da tôrre de umbilicais, Conf. VC+ET, para uma determinada distância desta em relação ao eixo longitudinal do veículo, UTd = 2.25 m, e velocidade de 31.0 m/s. Uma influência é exercida neste caso sobre os coeficientes de força transversal e de momento de rolamento, exclusivamente pela presença da tôrre de umbilicais, quando o veículo encontra-se em sua sombra. O coeficiente do momento de rolamento apresenta também uma variação em relação ao caso anterior para $\phi = 45°$, no entanto repetindo seu valor e direção para $\phi = 135°$, concordando novamente com o valor da configuração sem torre de umbilicais. No entanto não é possível concluir que houve um erro na medição ou anomalia durante os ensaios, visto não constar qualquer observação de tal natureza no protocolo de ensaios. Analisando resultados para outras velocidades de vento, foi observado o mesmo comportamento, portanto é assumido que tal valor seja correto.

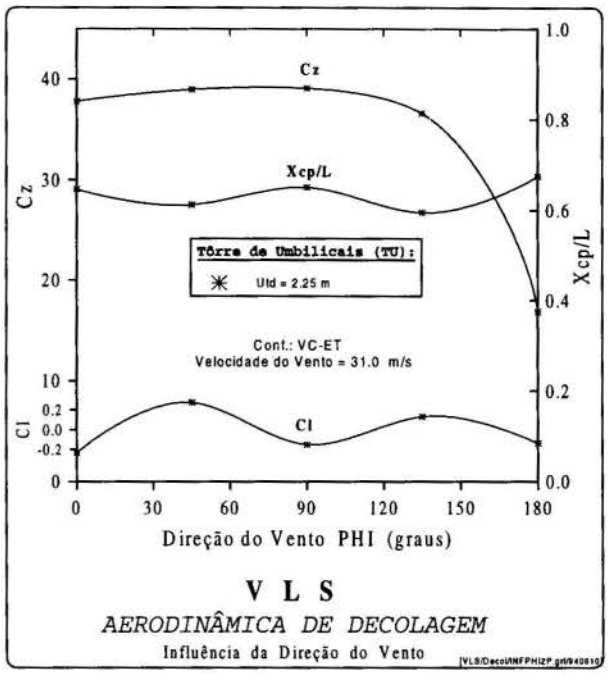


Figura 7 - Influência da direção do vento

INFLUÊNCIA DA TORRE DE UMBILICAIS

A influência exercida pela Torre de Umbilicais pode ser observada da Figura 8.

A torre de umbilicais encontra-se na posição azimutal de 180 °, provocando uma redução acentuada do coeficiente de força transversal. Esta redução está relacionada com o fato do conjunto veículo e mesa encontrar-se em região de escoamento bastante perturbado (esteira da torre). Sobre o coeficiente de momento de rolamento (vide comentários anteriores), bem como sobre a posição do centro de pressão não é exercida qualquer influência pela torre de umbilicais.

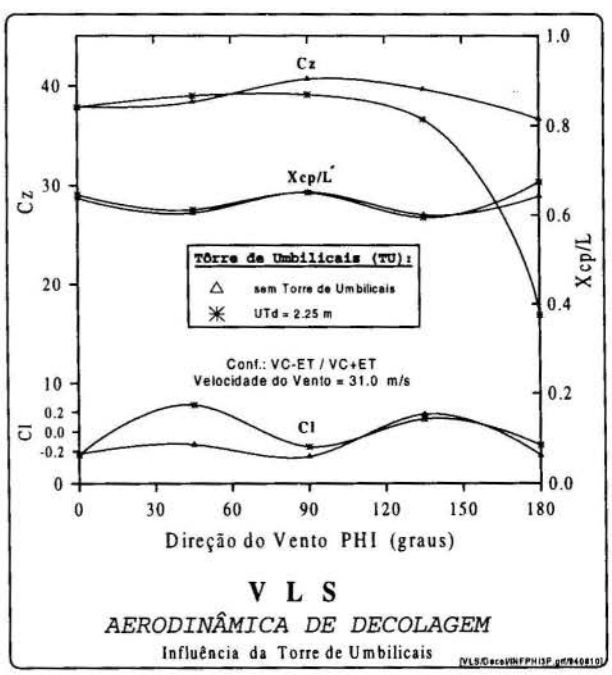


Figura 8 - Influência da Torre de Umbilicais

Com respeito a distância entre a Torre de Umbilicais e o Veículo (plano do eixo longitudinal), designada por UTd, foram feitos ensaios para: UTd = 2.25 m e 4.50 m. A figura 9 mostra no entanto que as diferenças entre os coeficientes, para as duas situações, são mínimas. Esta constatação permite admitir uma variação desta distância, no intervalo 2.25 m ≤ UTd ≤ 4.50 m, sem que haja necessidade de correção dos valores resumidos e apresentados para utilização no projeto.

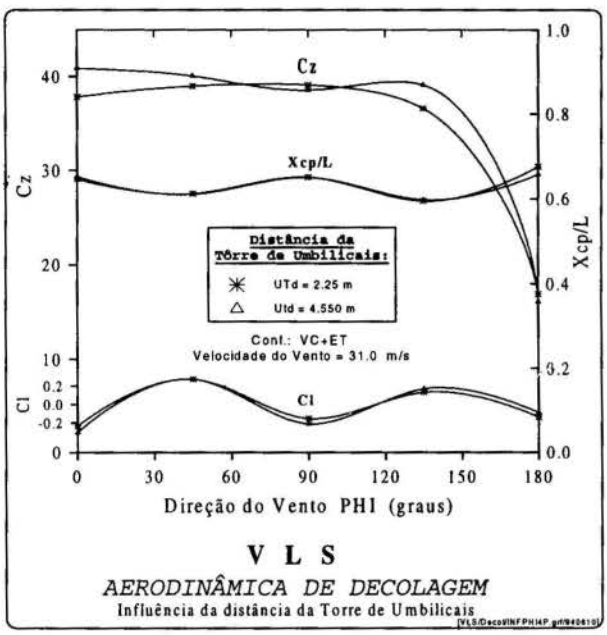


Figura 9 - Influência da Torre de Umbilicais

RESULTADOS PARA O PROJETO

A seguir são resumidos e apresentados os resultados de interesse para aplicação nas simulações da dinâmica de decolagem e do controle de atitude do veículo. O sistema de coordenadas adotado é o sistema de eixos do vento, i. e. **z** encontra-se na linha de ação do vento, acompanhando assim sua direção.

PHI	Cz	Cl	Xcp/L
°	-	-	-
0	37.81	-0.2353	0.6460
45	38.99	+0.2719	0.6122
90	39.11	-0.1516	0.6506
135	36.62	+0.1307	0.5950
180	16.89	-0.1359	0.6753

V_{VENTO} = 10 m/s 2.25 m ≤ UTd ≤ 4.50 m

Em função da complexidade da geometria e da interação do vento com o complexo veículo - torre - mesa de lançamento, bem como da influência que a tropografia local venha a exercer sobre o perfil, a velocidade e a variação da direção do vento, recomenda-se aplicar aos coeficientes apresentados, variações confome seguem: Cz ±10%, Cl ±15%, Xcp/L ±1%

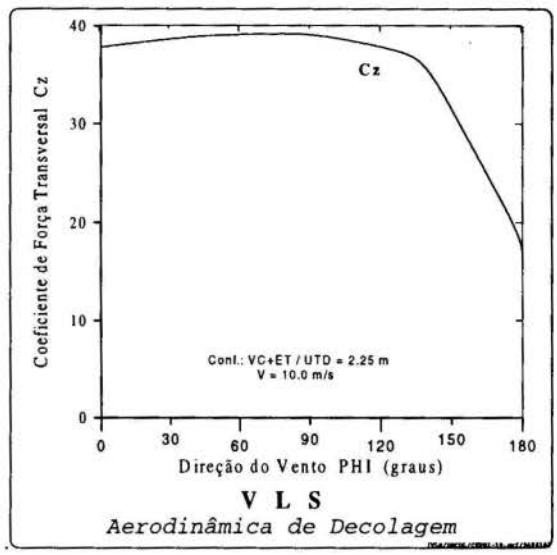


Figura 10 - VLS/Decolagem. Cz vs PHI.

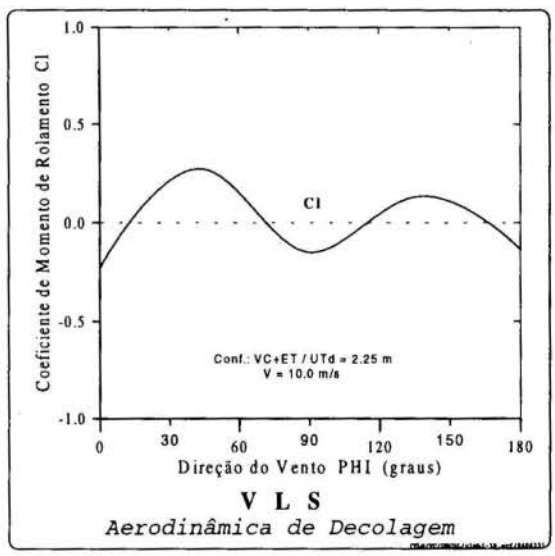


Figura 11 - VLS/Decolagem. Cl vs PHI.

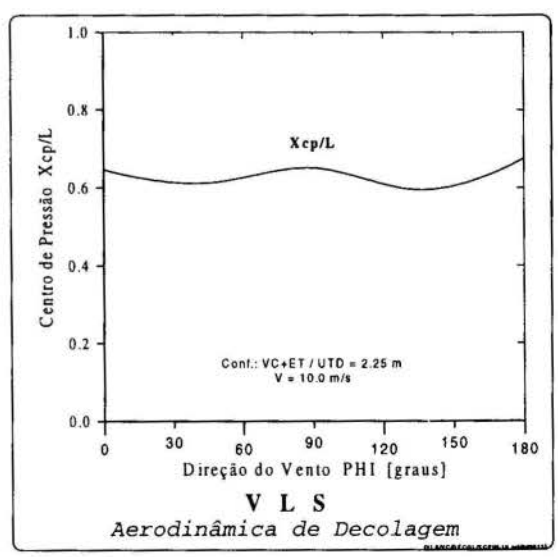


Figura 12 - VLS/Decolagem. Xcp/L vs PHI.

CONCLUSÕES

Tendo por base resultados de ensaios aerodinâmicos em túnel de vento de baixa velocidade, foi realizada uma análise das características aerodinâmicas do VLS durante a fase de decolagem. Na análise considerou-se a Configuração do Veículo sobre a mesa de Lançamento, com e sem a presença da Torre de Umbilicais.

Nas análises foram consideradas diferentes intensidades e direções de vento, e compreenderam todas as características aerodinâmicas estáticas pertinentes às fases de decolagem e dos instantes de vôo vertical do veículo.

Os resultados mostraram que variações dos coeficientes aerodinâmicos de interesse, coeficientes de força transversal e de momento de rolamento, são principalmente influenciadas pela direção do vento, não sendo relevante a influência da sua intensidade. A variação do centro de pressão é praticamente negligível, no intervalo considerado.

A distância entre a Torre de Umbilicais e o Veículo não exerce influência sobre os coeficientes aerodinâmicos apresentados, quando variada no intervalo $2.25\ m \leq UTd \leq 4.50\ m$.

Os resultados obtidos e apresentados permitiram uma melhor análise da dinâmica de decolagem do veículo, bem como do seu sistema de controle de atitude.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

/1/ Moraes, P. Jr., e Neto, A. A., 1988, "Ensaios Aerodinâmicos de Simulação da Decolagem do VLS", Relatório Interno, Subdivisão de Aerodinâmica, CTA/IAE/ ASE

/2/ NASA SP-8008, 1965, "Prelaunch Ground Wind Loads", NASA Space Vehicle Design Criteria

/3/ Moraes, P. Jr., 1994, "VLS. Aerodinâmica de Decolagem", Doc AED-590/35, CTA/IAE/ASE

ABSTRACT

The lift-off aerodynamic characteristics of VLS are presented. An analysis of the aerodynamics of the vehicle configuration, placed on the launch pad and supporting the ground wind, has been made. In the analysis, based on wind tunnel test results, several wind intensities and directions were considered. The presented results comprise all the aerodynamic static characteristics related to the lift-off phase and vertical flight of the vehicle.

ABCM

SEMI-ANALYTICAL SOLUTION FOR RADIAL STOKES FLOW BETWEEN TWO PARALLEL DISKS

JAUBER C. OLIVEIRA and CRISTINA H. AMON
Department of Mechanical Engineering
Carnegie Mellon University
Pittsburgh-PA-15213-U.S.A.

SUMMARY

A semi-analytical approach is proposed and implemented to approximate the solution of the partial differential equations that model the radial Stokes flow between two parallel disks. Our motivation is to provide a rigorous analytical investigation for this type of flow. Two traditional approaches for solving partial differential equations of mathematical physics, namely, eigenfunction expansions and Green's function representations, are used to obtain directly the pressure distribution for a variety of inflow boundary conditions. We, therefore, combine such standard techniques with a functional analytical framework to propose a proper representation for the pressure. In addition, numerical approximations are delayed as much as possible during the analysis. This methodology has been implemented in the symbolic software 'Mathematica'. We provide both validation of the work when exact solution exists and comparisons with fully numerical solvers for the cases of more complex inflow boundary conditions. This analytical work intends also to improve our understanding of the effects of the inflow boundary conditions and to provide insights for extending the method to handle the Navier-Stokes equations for radial flows.

INTRODUCTION

A semi-analytical solution is developed to approximate the solution of the partial differential equations that model the radial Stokes flow between two parallel disks. This geometry is useful in applications such as modeling hydrostatic air bearings, pneumatic micrometers, radial diffusers and compressor valves. This semi-analytical work is part of a more extensive research (Oliveira and Amon, 1996; and Oliveira, 1996) on radial flows and provides insights for applying the same methodology to the linearized equations for modeling the evolution of small disturbances (Oliveira, 1996).

Previous research was mainly based on analytical and experimental techniques with the objective of predicting and measuring the pressure distribution and boundary layer separation. Series expansions were utilized to include inertial effects in the analytical models. The region near to the inlet radius was the main source of discrepancy between analytical models and experiments (e.g., Jackson and Symmons, 1965; Savage, 1964; Wilson, 1972). Ishizawa (1966) combined series expansions to represent the inlet region with the integral method to represent the rest of the domain in order to account for inertia. Ishizawa's approach was not able to predict correctly flow separation and two-dimensional vortical structure (Raal, 1978). The disagreement is probably due to the inherent inaccuracy of the integral method. Chatterjee (1986) used classical integral transforms to solve the Stokes problem for the idealized case of the radial Stokes flow between two infinite parallel disks with axial inflow from a pipe. These two references represent the most important analytical contributions to this problem. However, search in the literature shows clearly that no analytical solution is available for the Stokes flow problem, except for a particular case where an exact solution exists. This motivated the present analysis, since this more general and rigorous treatment seems to be useful for applications in lubrication. Our goal is to provide a rigorous semi-analytical methodology which solves the two-dimensional Stokes flow problem for a variety of physically-meaningful inflow boundary conditions as well as to enable the extension to three dimensions.

FORMULATION OF THE PROBLEM

In this section, we describe the physically meaningful assumptions and the corresponding mathematical modeling for the radial Stokes flow of a Newtonian fluid between two parallel disks.

Throughout this paper, we assume that the flow is axisymmetric (i.e., independent on the angular coordinate in the cylindrical coordinate system) and incompressible. We impose an arbitrary, physically consistent velocity profile at the inlet. This study deals with a Newtonian fluid in a creeping flow.

The corresponding non-dimensional Stokes equations are presented next. We define the following non-dimensional variables:

$$u = U/Ve \quad v = V/Ve \quad p = P/\rho Ve^2 \quad r = R/s \quad x = X/s, \tag{1}$$

where U, V, P denote the dimensional (primitive) variables; X and R correspond to the axial and radial (dimensional) coordinates, respectively; $Re = Q/(2\pi\nu s) = Ve\, R1 / \nu$ is the Reynolds number, x is the non-dimensional axial coordinate and r is the non-dimensional radial coordinate; u and v denote the axial and radial directions, respectively; p is the non-dimensional pressure and t the time. Ve is the mean velocity at the inlet, s is the distance between the two parallel disks, ν is the kinematic viscosity and Q represents the flow rate.

Regarding notation, $\mathbb{N}$, $\mathbb{R}$ denote the set of positive integers and Real numbers, respectively. The symbol := will be used to indicate a definition.

To condense the notation, the following representation will be used for the viscous operators.

$$L_1 := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \tag{2}$$

$$L_2 := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \tag{3}$$

Then the governing equations are as follows,

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{r}\frac{\partial (vr)}{\partial r} = 0 \tag{4}$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{r1}{Re} L_1 u \tag{5}$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{r1}{Re} L_2 v \tag{6}$$

The boundary conditions in the domain $\Omega := (0,1) \times (r1, r2)$ are:

$$\text{a) } u = f(x),\ v = g(x) \ @\ r = r1,\ \forall x \in (0, 1) \tag{7}$$

$$\text{b) } u = 0,\ \frac{\partial (vr)}{\partial r} = 0,\ p = 0 \ @\ r = r2,\ \forall x \in (0, 1) \tag{8}$$

$$\text{c) } u = v = 0 \ @\ x = 0\ \&\ x = 1;\ \forall r \in (r1, r2) \tag{9}$$

The physical interpretation of Eqs. (7) to (9) corresponds to flow entering with arbitrary velocity distribution and leaving the domain with zero axial velocity profile under atmospheric pressure. No slip conditions are prescribed at both disks. We require the following *physical* constraint:

$$f, g \in \{w(x) \in C^2(0,1) : w(0) = 0,\ w(1)=0\} \text{ and } \int_0^1 g\, dx = 1 \tag{10}$$

RELATED PROBLEM (domain $\Omega := (0,1) \times (r1, r2)$)

It can be easily shown that Eqs. (2) to (9) are related to the problem of finding the velocity vector field $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = (u(x, r), v(x, r))$ and a (scalar) pressure field $p = p(\mathbf{x}, t)$ which, for $\mathbf{x} = (x, r) \in \Omega$, satisfy the following partial differential equations, for $\mathbf{v} \in C^2(\Omega) \times C^2(\Omega)$, $p \in C^1(\Omega)$; in fact, the solutions Usol, Vsol and Psol are given by $Usol = u + f(r - r2)/r1 - r2)$, $Vsol = v + g(x)\, r1/r$ and $Psol = p$.

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = f'(x)\,(r - r2)/(r1 - r2) \text{ in } \Omega \tag{11}$$

$$L_1 u = (Re/r1)\, \partial p/\partial x - \{f''(x)\,(r - r2)/(r1 - r2) + f(x)/(r(r1 - r2))\} \text{ in } \Omega \tag{12}$$

$$L_2 v = (Re/r1)\, \partial p/\partial r - (r1/r)\, g''(x) \text{ in } \Omega \tag{13}$$

$$u = 0,\ v = 0 \ @\ r = r1,\ \forall x \in (0, 1) \tag{14}$$

$$u = 0,\ \frac{\partial (vr)}{\partial r} = 0,\ p = 0 \ @\ r = r2,\ \forall x \in (0, 1) \tag{15}$$

$$u = v = 0 \ @\ x = 0\ \&\ x = 1;\ \forall r \in (r1, r2) \tag{16}$$

Our goal throughout this work is to find a solution to Eqs.(11) to (16).

FUNCTIONAL ANALYTIC SETTINGS

We consider the function spaces:

$$\mathcal{L}_2(\Omega) := \{ w: \Omega \to \mathbb{R} \mid \int_\Omega |w|^2\, d\Omega < \infty \} = \text{"the space of real-valued square-integrable functions"} \tag{17}$$

$$\mathcal{H}^1(\Omega) := \{w: \Omega \to \mathbb{R} \mid w \in \mathcal{L}_2(\Omega) \text{ and } \partial w/\partial x,\ \partial w/\partial r \in \mathcal{L}_2(\Omega)\} = \text{"the Sobolev space of order one"} \tag{18}$$

$$\mathcal{H}_0^1(\Omega) := \{w \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid w = 0 \text{ on } \Gamma_0\} \tag{19}$$

Γ_0 denotes the boundaries of the domain (Ω) where Dirichlet boundary conditions are prescribed (see Eqs. (7) to (9)).

The following inner products are associated with Eqs. (17) to (19):

a) inner product in $\mathcal{L}_2(\Omega)$,

$$(u \mid^{\Omega} v) := \int_\Omega u\, v\, d\Omega,\ \forall\ u, v \in \mathcal{L}_2(\Omega) \tag{20}$$

b) inner product in $\mathcal{H}^1(\Omega)$,

$$((v \mid^{\Omega} w)) := (v \mid^{\Omega} w) + (\partial v/\partial x \mid^{\Omega} \partial w/\partial x) + (\partial v/\partial r \mid^{\Omega} \partial w/\partial r),\ \forall\ v, w \in \mathcal{H}^1(\Omega) \tag{21}$$

c) inner product in $\mathcal{H}_0^1(\Omega)$

$$((v \mid^{\Omega} w))_0 := (\partial v/\partial x \mid^{\Omega} \partial w/\partial x) + (\partial v/\partial r \mid^{\Omega} \partial w/\partial r),\ \forall\ v, w \in \mathcal{H}_0^1(\Omega) \tag{22}$$

We shall use either $(\mid^r)$ to denote the inner product in $\mathcal{L}_2(r1, r2)$ or $(\mid^x)$ to denote the inner product in $\mathcal{L}_2(0, 1)$. Similarly for $\mathcal{H}^1$ and $\mathcal{H}_0^1$.

APPROACH I: DIAGONALIZING L_1 AND L_2 (EIGENFUNCTION EXPANSION)

Eigenvalue Problems. To take the most advantage of the linearity of the governing non-dimensional equations, the following auxiliary eigenvalue problems are defined with corresponding homogenous boundary conditions identical to Eqs. (14) to (16). We shall use the notation BCu and BCv to represent these homogeneous boundary conditions for u and v, respectively.

$$L_1 u_{mn} = -\alpha^2_{mn}\, u_{mn} \tag{23}$$

$$L_2 v_{pq} = -\beta^2_{pq}\, v_{pq} \tag{24}$$

where, $\alpha^2_{mn} := (\alpha_m)^2 + (n\pi)^2$ and $\beta_{pq}^2 := (\beta_p)^2 + (q\pi)^2$ are the eigenvalues and u_{mn} and v_{pq}, for p, q $\in \mathbb{N}$, are the set of eigenfunctions in $\mathcal{L}_2(\Omega)$ corresponding to the operators L_1 and L_2.

Eigenfunctions. The eigenfunctions corresponding to Eq. (23) and Eq. (24) are:

$$u_{mn} = \sin(n\pi x)\, R^u_{0m}(r) \tag{25}$$

$$v_{kl} = \sin(l\pi x)\, R^v_{1k}(r) \tag{26}$$

where

$$R^u_{0m}(r) = [\, J_0(\alpha_m r)\, Y_0(\alpha_m r2) - J_0(\alpha_m r2)\, Y_0(\alpha_m r)\,] \tag{27}$$

$$R^v_{1k}(r) = [\, Y1(\beta_k r) - J_1(\beta_k r)\, Y_1(\beta_k r1) / J_1(\beta_k r1)] \tag{28}$$

The corresponding normalization integrals are given by:

$$N(\beta_k) = \{\, r2^2 [\, Y1(\beta_k r2) - J_1(\beta_k r2)\, Y_1(\beta_k r1) / J_1(\beta_k r1)] - r1^2 [\, - Y0(\beta_k r1) + J_0(\beta_k r1)\, Y_1(\beta_k r1) / J_1(\beta_k r1)]\,\} \tag{29}$$

$$N(\alpha_m) = 2\, [J_0^2(\alpha_m r1) - J_0^2(\alpha_m r2)]/(\pi\, \alpha_m\, J_0(\alpha_m r1))^2 \tag{30}$$

with α_m and β_k being determined from the following equations:

$$J_1(\beta_k r1)\, Y_0(\beta_k r2) - J_0(\beta_k r2)\, Y_1(\beta_k r1) = 0 \tag{31}$$

$$J_0(\alpha m\, r1)\, Y_0(\alpha m\, r2) - J_0(\alpha m\, r2)\, Y_0(\alpha m\, r1) = 0 \tag{32}$$

for k, m = 1, 2, 3, ...

INCOMPRESSIBILITY CONSTRAINT

To enforce the velocity vector field to satisfy mass conservation for incompressible flow, we impose Eq. (11) in the following (generalized) sense (see Oliveira, 1996 for proof and hypothesis involved).

$$\begin{aligned}&(u\,|^{\Omega}\, \eta_x) + (v\,|^{\Omega}\, \eta_r) - \\ &(2r1^3 - 3r2\, r1^2 + r2^3)\,(f\,|^{x}\, \eta_x(x, r1))\,/(6(r1 - r2)) = \\ &(\eta_{xr}\,|^{\Omega}\, f(x)\,(2\, r^3 - 3\, r2\, r^2 + r2^3)/r)\,/(6\,(r1 - r2)), \\ &\forall \eta(x,r) \in \mathbf{N} := \{w \in \mathcal{H}^1(\Omega) : w(x,r1) \in \mathcal{H}^1(0,1) \\ &\text{and } w(x,r2) = 0,\ \forall x \in (0, 1)\}\end{aligned} \tag{33}$$

EIGENFUNCTIONS FOR THE PRESSURE

We define the following set of functions (Oliveira, 1996):

$$\begin{aligned}&SS0_m : \mathbb{N} \times [r_1, r_2] \subset \mathbb{N} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R} : \\ &(m, r) \to (1/r)\, d(r\, R^v_{1m}(r))/dr\end{aligned} \tag{34}$$

It can be shown that

$$\begin{aligned}&(SS0_m\,|^{\Gamma}\, SS0_n) = (\beta_m^2)\, N(\beta_m)\, \delta_{mn} \text{ and } SS0_m(r_2) = 0, \\ &\forall\, m,n \in \mathbb{N}\end{aligned} \tag{35}$$

Furthermore, it can be shown (Oliveira, 1996) that $\{SS0_m(r)\}$, for $m \in \mathbb{N}$, form a complete set of eigenfunctions generated by the following eigenvalue problem:

$$Y'' + (1/r)\, dY/dr + \lambda^2 Y = 0,\ Y'(r1)=0,\ Y(r2)=0, \text{ i.e., } Y_m = SS0_m(r) \text{ and } \lambda^2 = \beta_m^2, \tag{36}$$

where $Y' := dY/dr$ and $m \in \mathbb{N}$. We can also show that $SS0_m(r)$ is (consistently) linearly dependent to $J_0(\beta_m r)\, Y_0(\beta_m r2) - J_0(\beta_m r2)\, Y_0(\beta_m r)$.

Eq. (33) leads to a linear algebraic system of equations to determine the pressure. To obtain this system, we need to choose a convenient basis for η and expand the pressure with respect to this basis. These steps are discussed in Oliveira (1996). Notice also that $SS0_m(r)$ shows up naturally from this approach.

APPROACH II: INVERSION OF L_1 AND L_2 (GREEN'S FUNCTION)

To obtain the Green's Function representation for the radial component of the velocity, we consider the auxiliary equation:

$$L_2 G = (\nabla^2 - 1/r^2) G = -\,\delta(x - x_0)\, \delta(r - r_0)/r \tag{37}$$

This equation is *symbolic* because it has mathematical meaning (i.e., it is well-defined) only when interpreted in the sense of distribution theory. In fact we could have presented the problem in a generalized sense, since no classical solutions exist for such a problem. Indeed, this is a way to show in which sense Eq. (42) solves Eq. (37). See Oliveira (1996) for details regarding this problem and Friedman (1956) and Zeidler (1995) as general references on this subject.

We solve Eq. (37) with BCv through the following series expansion:

$$Gv(x, r; x_0, r_0) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(x, x_0)\, R^v_{1n}(r_0)\, R^v_{1n}(r) \tag{38}$$

After some calculations, we obtain that

$$a_n(x, x_0) = f(x, x_0) / [-\,\beta_n\, N(\beta_n) \sinh(\beta_n)], \tag{39}$$

where $f(x, x_0) = \sinh(\beta_n x) \sinh[\beta_n (x_0 - 1)]$ for $x < x_0$ and
$f(x, x_0) = \sinh(\beta_n (x - 1)) \sinh[\beta_n x_0]$ for $x > x_0$ (40)

The Green's Function representation for the radial component of the velocity is found by applying Green's formula and using Eq. (37) and Eq. (14) to obtain the following:

$$\begin{aligned}&\int_\Omega (v\, L_2 Gv - Gv\, L_2 v)\, dS = \int_\Omega (v\nabla^2 Gv - Gv\nabla^2 v)\, dS = \\ &\int_{\partial\Omega} (v\, \nabla Gv - Gv\, \nabla v).\, \mathbf{n}\, d\Gamma\end{aligned} \tag{41}$$

$$\begin{aligned}&\Rightarrow v(x_0, r_0) = -\,(Re/r1)\,(Gv\,|^{\Omega}\, \partial p/\partial r) + \\ &(Gv\,|^{\Omega}\, (r1/r)\, g''(x)),\end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned}&v(x, r) = (Re/r1)\,(p\,|^{\Omega *}(1/r_0)\partial(r_0 Gv(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0))/\partial r_0) + \\ &(Gv\,|^{\Omega *}(r1/r_0)\, g''(x_0))\end{aligned} \tag{43}$$

To obtain the Green's function representation for the axial component of the velocity, we consider the following equation:

$$L_1 Gu = \nabla^2 Gu = -\delta(x - x_0)\,\delta(r - r_0)/r \tag{44}$$

We solve Eqs. (45) with BCu through the following expansion:

$$Gu(x, r; x_0, r_0) = \sum_{m=1}^{\infty} b^*_m(r, r_0)\ \mathrm{Sin}(m\pi x)\ \mathrm{Sin}(m\pi x_0) \tag{45}$$

where

$$b^*_m(r, r_0) = C_2\, F0_m(r_1, r) \text{ for } r < r_0 \text{ and}$$

$$= C_2^*\, F0_m(r_2, r) \text{ for } r > r_0 \tag{46}$$

and

$$C_2(y_0) := -(2/y_0)/\{\ m\pi\ (F1_m(r_1, y_0) - F0_m(r_1, y_0)\ F1_m(r_2, y_0)/F0_m(r_2, y_0)\ )\} \tag{47}$$

$$C_2^*(y_0) := C_2(y_0)\ F0_m(r_1, y_0)/\ F0_m(r_2, y_0) \tag{48}$$

$$F1_m(y, y_0) := I_1(m\pi y_0)\ K_0(m\pi y)/I_0(m\pi y) + K_1(m\pi y_0) \tag{49}$$

$$F0_m(y, y_0) := -\ I_0(m\pi y_0)\ K_0(m\pi y)/I_0(m\pi y) + K_0(m\pi y_0) \tag{50}$$

The Green's function representation for the axial component of the velocity is found by applying Green's formula and using Eq. (12) and Eq. (44) to obtain the following:

$$(u|^{\Omega} L_1 Gu) - (Gu\ |^{\Omega} L_1 u)\ dS = (u\ |^{\Omega} \nabla^2 Gu) - (Gu|^{\Omega} \nabla^2 u) = \int_{\partial\Omega} (u\ \nabla Gu - Gu\ \nabla u).\ \mathbf{n}\ d\Gamma = 0 \tag{51}$$

$$\Rightarrow u(x, r) = (Re/\ r1)\ (p(x_0, r_0)\ |^{\Omega\theta}\ \partial Gu(x, r; x_0, r_0)/\partial x_0) + (\{f''(x_0)\ (r_0 - r2)/(r1 - r2) + f(x_0)/(r_0\ (r1 - r2))\}|^{\Omega\theta}\ Gu\ (\mathbf{x}; \mathbf{x}_0)) \tag{52}$$

CONSERVATION OF MASS

To enforce the velocity vector field to satisfy the mass conservation principle, Eq. (34) is imposed. We substitute Eq. (44) and Eq. (53) into Eq. (34) so as to obtain:

$$\begin{aligned}
&(Re/r1)\{(\ (\ p(\mathbf{x}_0)\ |^{\Omega o}\ \partial Gu(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0)/\partial x_0)\ |^{\Omega}\ \eta_x) + \\
&(\ (p(\mathbf{x}_0)\ |^{\Omega o}\ (1/r_0)\ \partial(r_0 Gv(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0))/\partial r_0)\ |^{\Omega}\ \eta_r)\ \} \\
&= (\eta_{xx}\ |^{\Omega}\ f(x)\ (2\ r^3 - 3\ r2 r^2 + r2^3)/r)\ /(6(r1 - r2)) - \\
&((Gv\ |^{\Omega o}\ (r1/r_0)\ g''(x_0))\ |^{\Omega}\ \eta_r) \\
&-((\{f''(x_0)\ (r_0 - r2)/(r1 - r2) + \\
&f(x_0)/(r_0\ (r1 - r2))\}\ |^{\Omega o}\ Gu\ (\mathbf{x}; \mathbf{x}_0))\ |^{\Omega}\ \eta_x) \\
&+ (2r1^3 - 3r2\ r1^2 + r2^3)\ (f\ |^{x}\ \eta_x(x, r1))\ /(6(r1 - r2)), \\
&\forall \eta(x, r) \in \mathbf{N}
\end{aligned} \tag{53}$$

This is an integral (generalized) equation for the pressure, i.e., by solving this integral equation we would obtain also u and v from Eq. (43) and Eq. (52). The advantage of following this methodology is that p is *directly* obtained and we require less regularity from the dependent variables. In creeping flows with constant properties and no significant body forces, the pressure field is harmonic; however, its boundary values are not known in advance.

PRESSURE'S REPRESENTATION AND ALGEBRAIC EQUATIONS

We introduce the following representation for the pressure p(x, r):

$$p = \sum_{q=1}^{\infty} p^*_{0q}\ 1SS0_q(r) + \sum_{p,q=1}^{\infty} p^*_{pq}\ \mathrm{Cos}(p\ \pi\ x).SS0_q(r) \tag{54}$$

where

$$p^*_{0q} = ((p\ |^{r}\ SS0_q)\ |^{x}\ 1)/[(\beta_q^2)\ N(\beta_q)] = (p\ |^{\Omega} SS0_q\ \ 1)/[(\beta_q^2)\ N(\beta_q)] \tag{55}$$

and $1(x) := 1,\ \forall x \in [0, 1]$ and for $p \neq 0$,

$$p^*_{pq} = (p\ |^{\Omega}\ SS0_q\ \mathrm{Cos}(p\ \pi\ x))/[2(\beta^2_q)\ N(\beta_q)] \tag{56}$$

Eq. (53), for $\eta = \mathrm{Cos}(s\ \pi\ x)\ SS0_t$ ($s = 0, 1, 2, \ldots$ and $t \in \mathbb{N}$), becomes:

$$\begin{aligned}
&(Re/r1)\{(s\pi/2)^2 \sum_{q=1}^{\infty} p^*_{sq}\ (SS0_q(r_0)\ |^{r\theta}\ (b^*s(r, r_0)\ \ |^{r}\ SS0_t)\ ) \\
&+ (\beta t)^4\ N(\beta_t)^2\ \{\ p^*_{0t}\ ((\ 1\ |^{x\theta}\ a_t(x, x_0))\ |^{x}\ \mathrm{Cos}(s\pi x)) + \\
&\sum^{\infty} p^*_{pt}\ ((\mathrm{Cos}(p\pi x_0)\ |^{x\theta}\ a_t(x, x_0)\ )\ |^{x}\ \mathrm{Cos}(s\pi x)\ )\ \} \\
&= s\pi(\beta t)^2\ (\mathrm{Sin}(s\pi x)\ |^{x}\ f(x))\ (R^{V}{}_{1t}(r)\ |^{r}q^*(r))\ /(6\ (r1 - r2)) - \\
&(\beta t)^2\ N(\beta t)\ ((a_t(x, x_0)\ |^{x}\ \mathrm{Cos}(s\pi x))\ |^{x\theta}g''(x_0))(R^{V}{}_{1t}\ (r_0)|^{r\theta}\ r1/r_0) \\
&+ ((s\pi)^3/2)\ (f(x_0)\ |^{x\theta}\ \mathrm{Sin}(s\pi x_0))\ ((q1|^{r\theta}\ b^*s(r, r_0)\ )\ |^{r}\ SS0_t(r)) \\
&-((s\pi)/2)\ (f(x_0)\ |^{x\theta}\ \mathrm{Sin}(s\pi x_0))\ ((q2|^{r\theta}\ b^*s(r, r_0))\ \ |^{r}\ SS0_t) \\
&-s\pi\ (2r1^3 - 3r2\ r1^2 + r2^3)\ SS0_t(r1)\ (f\ |^{x}\ \mathrm{Sin}(s\ \pi\ x))\ /(6(r1 - r2)) \\
&s = 1, 2, \ldots \text{ and } t \in \mathbb{N}
\end{aligned} \tag{57}$$

where $q^*(r) := (2\ r^3 - 3\ r2\ r^2 + r2^3)/r$, $q1 := (r_0 - r2)/(r1 - r2)$, $q2 := 1/(r_0(r1 - r2))$.

$$\begin{aligned}
&p^*_{0t}\ ((\ 1\ |^{x\theta}\ a_t(x, x_0))|^{x}1) + \sum_{p=1}^{\infty} p^*_{pt}((\mathrm{Cos}(p\pi x_0)|^{x\theta}\ a_t(x, x_0))\ |^{x}\ 1\ ) \\
&= -(r1/((\beta t)^2\ N(\beta t)\ Re))\ ((a_t(x, x_0)\ |^{x\theta}\ g''(x_0))\ |^{x}\ 1) \\
&(R^{V}{}_{1t}(r_0)\ |^{r\theta} r1/r_0),\ \text{for } s = 0 \text{ and } t \in \mathbb{N}
\end{aligned} \tag{58}$$

Notice that we must evaluate 14 different one-dimensional integrals in order to solve the algebraic system of equations. Fortunately, analytical formulas are available for several of them (see, e.g., Wheelon, 1968). The algebraic system is solved and all analytical and numerical integrations are performed in a program written in the symbolic software 'Mathematica' (Wolfram, 1991) in order to take advantage of its symbolic manipulations and libraries. See Oliveira (1996) for additional details and analysis.

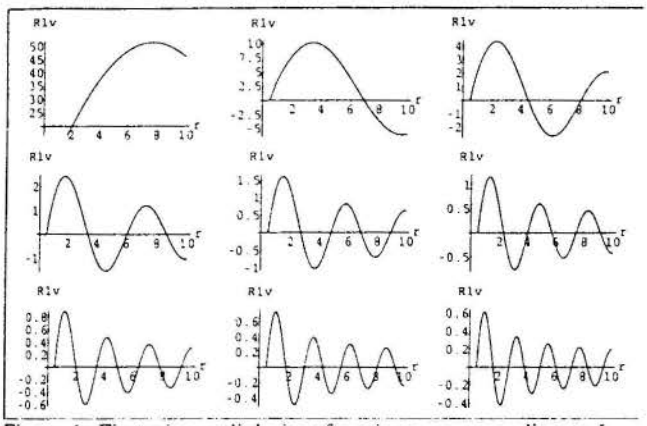


Figure 1: First nine radial eigenfunctions corresponding to L_2.

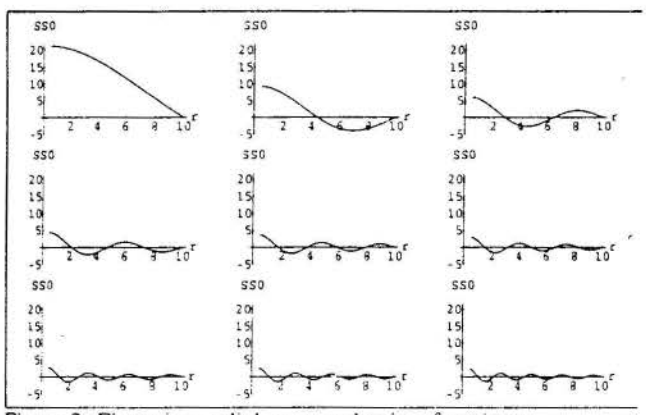


Figure 2: First nine radial pressure's eigenfunctions.

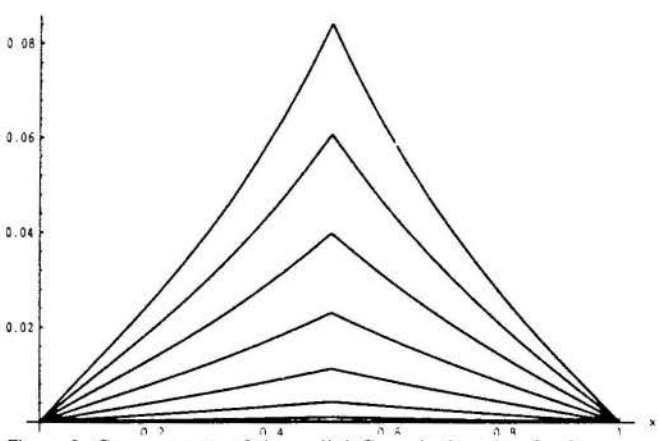


Figure 3: Components of the radial Green's function for L_2.

RESULTS

The semi-analytical results obtained so far are presented in terms of eigenfunctions and are then compared to exact and numerical solutions for different inflow boundary conditions. Figures 1 and 2 depict the first nine eigenfunctions of the linear partial differential operator L_2 and of the pressure modes, respectively. Components for the axial (b^*_m - Eq. 46) at x = 0.5 and the radial Green's functions (a_n - Eq. 39) at r = 5 are shown in Figs. 3 and 4.

To validate the present methodology, we compare first in Fig. 5 our approximate semi-analytical solution with an exact solution [$p(r) = 12\, r_1^2 \ln(r2/r)$] for the unique case where such an exact solution exists, i.e., the inflow conditions u = 0 and v = 6 ($x - x^2$). We obtain a good agreement with the exact solution using only 10 terms in the eigenfunction expansion to represent the pressure when only the fundamental mode is used in the axial direction.

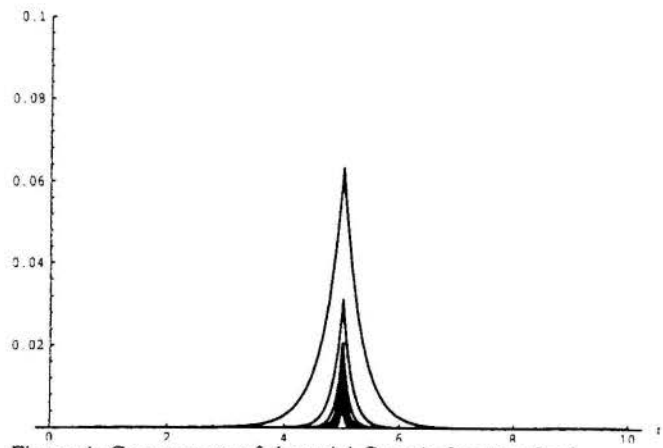


Figure 4: Components of the axial Green's function for L_1.

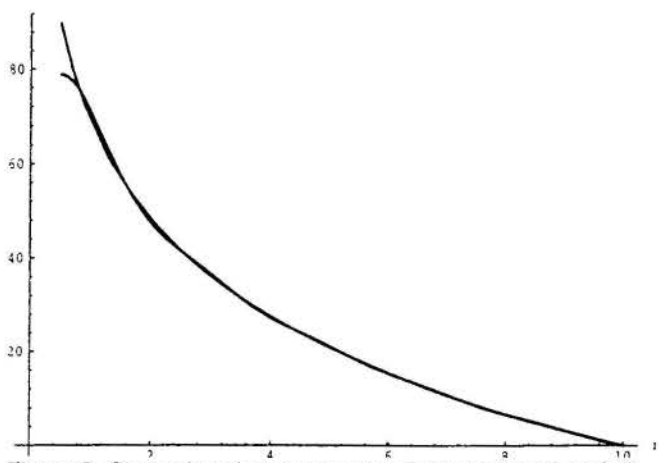


Figure 5: Comparison between exact solution and semi-analytical approximation (the line with slope zero at r = 0.5) with ten terms in the radial direction.

Next, we impose a more complex inflow boundary condition corresponding to a two-dimensional flow given by the functions: $u = -2x^3 + 2x^2$, $v = 6(x - x^2)$. The pressure field due to this inflow condition is two-dimensional. Then, we compare our predictions with 10 modes in the x- and r- directions with numerical solutions obtained with an accurate spectral element solver. The spectral element numerical solution is based on a discretization of the computational domain with 48 macro-elements, 5 x 5 collocation points per macro-element and a total of 1,200 nodal points. Figures 6(a) and (b) show the comparisons between the semi-analytical and numerical results at x = 1 and x = 0.75, respectively, with numerical data taken at r = 0.5, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 and 10. Outside the region exhibiting the Gibbs phenomenon, the agreement in both cases is still quite

reasonable with a pointwise error below 7% using this reduced number of modes. The accuracy of our semi-analytical solution can be improved substantially and the error decreased by simply adding more terms in the expansion. Notice also that the approximation gets increasingly better as one goes from x = 1 to x = 0. Therefore, Figure 6(a) shows the worst possible scenario for this specific inflow condition.

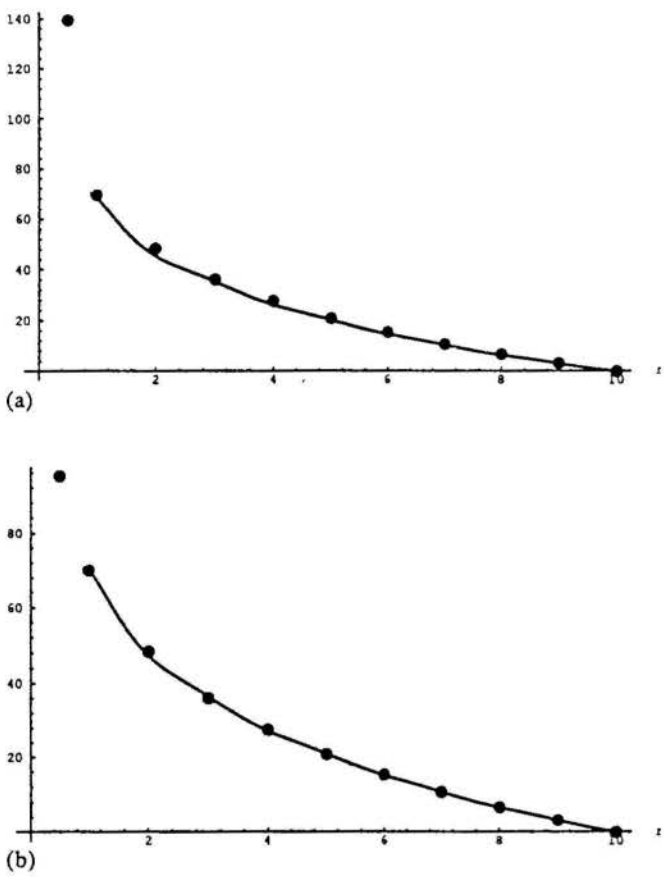


Figure 6: Comparison between highly accurate numerical solution (dots) and semi-analytical prediction (continuous line) for an inflow condition for which no exact solution exists at a) x = 1.0 and b) x = 0.75.

CONCLUSIONS

This paper has presented a semi-analytical formulation for solving the Stokes problem for flows between two parallel disks. The full methodology has been implemented in the software *Mathematica* (Wolfram, 1991), so as to take advantage of its symbolic representation and capabilities as well as to provide an intuitively simple implementation. The results from this semi-analytical approach using ten eigenfunctions in each direction were compared with both an exact solution independent of the axial direction and a numerical solution. Outside the region exhibiting the Gibbs phenomenon, the agreement is very good in both cases. The numerical solution corresponds to a more complex and realistic inflow boundary condition and employs a highly accurate spectral element solver. Since many of the integrations are independent of the input data (inflow functions), they are evaluated only once and all subsequent calculations (for different inflow functions) use these initial results. This fact enables a fast performance which still retains the advantages of minimizing round-off errors. Work is underway to extend the proposed method to handle the steady-state Navier-Stokes equations and to use the approach proposed by Gottlieb et al. (1992) to eliminate the Gibbs phenomenon effects and allow spectral accuracy with a few number of modes.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to acknowledge the financial support received from the Brazilian government (CNPq) and the computational facilities provided by NSF Grant CTS-9311072.

REFERENCES

Chatterjee, A., 1986, "Radial Flow Plasma Reactors: Fluid Dynamic and Transport Studies," Ph.D. Thesis, Pennsylvania State Univ.

Friedman, B., 1956, "Principles and Techniques of Applied Mathematics," John Wiley & Sons, Inc.

Gottlieb, D., Shu, C.-W., Solomonoff, A. and Vandeven, H., 1992, "On the Gibbs Phenomenon I: Recovering Exponential Accuracy From the Fourier Partial Sum of a Non-periodic Analytic Function," J. of Comp. and Appl. Math., vol. 43, pp. 81-98.

Ishizawa, S., 1966, "The Axisymmetric Laminar Flow in an Arbitrary Shaped Narrow Gap," Bull. of JSME, vol. 9, no. 33, pp. 86-103.

Jackson, J.D and Symmons, G.R., 1965, "An Investigation of Laminar Radial Flow Between Two Parallel Discs," Appl. Sci. Res., vol. 15, pp. 59-75.

Oliveira, J.C. and Amon, C.A., 1996, "Evolution of Non-linear Instabilities in Radial Flows," ENCIT 96/LATCYM 96, Federal University of Santa Catarina, Florianopolis-SC-Brazil.

Oliveira, J.C., 1996, "Evolution of Instabilities in Radial Flows," Ph.D. Thesis (in progress), Carnegie Mellon Univ., Pittsburgh, PA.

Raal, J.D., 1978, "Radial Source Flow Between Parallel Disks," J. Fluid Mech., vol. 85, part 3, pp. 401-416.

Savage, S.B., 1964, "Laminar Radial Flow Between Parallel Disks," Trans. ASME, vol. 31, pp. 594-596.

Wheelon, A.D., 1968, "Tables of Summable Series and Integrals Involving Bessel Functions," Holden-Day Advanced Physics Monographs, Holden-Day, Inc..

Wilson, S.D.R., 1972, "A Note on Laminar Radial Flow Between Parallel Plates, " Appl. Sci. Res., vol. 25, pp. 349-354.

Wolfram, S., 1991, "Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer," Addison-Wesley Publ. Co., Inc..

Zeidler, E., 1995, "Applied Functional Analysis: applications to mathematical physics," Applied Mathematical Sciences, vol. 108. Springer-Verlag, 1995.

MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESCOAMENTO LAMINAR PERMANENTE NA REGIÃO DE ENTRADA DE UM DUTO CIRCULAR

Sérgio R. Fontes e Marcius F. Giorgetti
Departamento de Hidráulica e Saneamento
Escola de Engenharia de São Carlos - USP
13560-250 - São Carlos - SP - Brasil

RESUMO

O escoamento laminar permanente na região de entrada de um duto circular é modelado através de uma técnica original. São propostas uma seqüência de funções aproximadas para a evolução do perfil de velocidades na região de entrada, com base na teoria de expansão de funções em séries de Fourier. Resultados da velocidade e da queda de pressão, calculados a partir das funções propostas e das equações de conservação em sua formulação integral, são apresentados na forma gráfica. Os resultados obtidos apresentam um bom acordo com a literatura.

INTRODUÇÃO

Qualitativamente a natureza do escoamento laminar na região de entrada de uma tubulação é bem descrita na literatura e está associada ao crescimento da camada limite laminar nessa região. Do ponto de vista quantitativo várias soluções analíticas aproximadas foram criadas por diferentes pesquisadores para caracterizar o escoamento e calcular parâmetros importantes como por exemplo o perfil de velocidades, a queda de pressão e a perda de carga ao longo do escoamento. Soluções analíticas exatas não são obtidas devido à não linearidade da equação diferencial obtida para o fenômeno a partir da equação de Navier-Stokes.

Essencialmente podem-se dividir em dois grupos os diferentes métodos de solução aproximados para as equações do escoamento. Um deles, inteiramente numérico, substitue as equações diferenciais não lineares por equações de diferenças finitas ou elementos finitos. Em outro grupo, analítico-numérico, as equações do escoamento são solucionadas através de um modelo analítico com o apoio do cálculo numérico. Neste caso encontra-se na literatura propostas de modelos de distribuições de velocidade na região de entrada como a de Fargie e Martin (1971) ou de Gupta e Agarwal (1993), ou soluções a partir do método das perturbações baseado no escoamento completamente desenvolvido (Tatsumi, 1952), ou ainda proposta de linearização da equação da quantidade de movimento (Sparrow et al., 1964).

Diversas aplicações na área de mecânica dos fluidos estão associadas ao problema do escoamento de entrada. Tem-se por exemplo: i) o caso de decantadores laminares de altas taxas de remoção (Rajaratman et al., 1991), úteis em processos de tratamento de águas residuárias e de abastecimento; (ii) em escoamento de sangue em veias na entrada do coração (Singh e Sinha, 1978) e em estreitamentos do tipo estenose (Lee, 1994), importantes no projeto de bombas de escoamento sanguíneo extracorpóreo onde é necessário conhecer com precisão os coeficientes de perda de carga do escoamento.

Neste trabalho apresenta-se uma solução analítico-numérica em que a evolução do perfil de velocidades na região de entrada é aproximada por funções descritas usando-se séries de Fourier e séries modificadas a partir das séries de Fourier. Com a teoria de expansão de funções em séries de Fourier, uma expressão que representa a evolução do perfil de velocidades é proposta para a modelagem do escoamento na região de entrada. A partir dessa expressão, outras modificadas, são investigadas para a melhor descrição e modelagem do escoamento.

Neste trabalho utiliza-se o método de formulação integral conforme a metodologia empregada por Campbell e Slaterry (1963), para obter-se a solução. Os resultados obtidos com as funções propostas são comparados com os resultados de outras investigações, examinando-se os valores da queda de pressão e da velocidade ao longo do duto.

FORMULAÇÃO

As equações integrais da continuidade, quantidade de movimento e energia mecânica escritas para a componente longitudinal da velocidade na forma adimensional são respectivamente:

$$\int_0^1 \bar{u}\,\bar{r}\,d\bar{r} = \frac{1}{2} \tag{1}$$

$$-\frac{1}{2}\frac{d\bar{P}}{d\bar{x}} = \frac{d}{d\bar{x}}\int_0^1 \bar{u}^2\,\bar{r}\,d\bar{r} - \left.\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}}\right|_{\bar{r}=1} \tag{2}$$

$$\frac{d\bar{P}}{d\bar{x}} = -\frac{d}{d\bar{x}}\int_0^1 \bar{u}^3\,\bar{r}\,d\bar{r} - 2\int_0^1 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}}\right)^2 \bar{r}\,d\bar{r} \tag{3}$$

onde as variáveis $\bar{x}$, $\bar{r}$, $\bar{u}$ e $\bar{P}$ são adimensionais escritos na forma:

$$\bar{x} = \frac{\upsilon x}{R^2 u} = \frac{4x}{\mathrm{Re}_D D};\quad \bar{r} = \frac{r}{R};\quad \bar{u} = \frac{u}{U};\quad \bar{P} = \frac{P}{\rho U^2};\ \text{e}$$

x - posição longitudinal; r - posição radial;

u - velocidade axial; P - pressão estática;
R - raio do duto; U - velocidade média do escoamento;
ρ - massa específica do fluido; ν - viscosidade cinemática do fluido; Re_D - número de Reynolds. Ao escrever as equações levaram-se ainda em consideração as seguintes hipóteses simplificadoras comuns em escoamentos de entrada:

i-) a componente axial da velocidade é muito maior que a componente radial;

ii-) as variações da velocidade em relação a variável radial são muito maiores que em relação a variável axial;

iii-) a pressão é função somente da variável axial;

iv-) a função dissipação, termo da equação da energia, é escrita como: $\mu\left(\partial\bar{u}/\partial\bar{r}\right)^2$

MODELAGEM

Analisando-se as condições de contorno do escoamento laminar na região de entrada de um duto circular, procurou-se encontrar uma função que envolvesse apenas um parâmetro livre, função da posição axial no duto, e cuja variação representassse adequadamente a evolução do perfil de velocidades desde a entrada do duto até a posição de escoamento completamente desenvolvido.

A figura 1 representa as condições de contorno do escoamento para o perfil de velocidades. Considera-se na figura o duto cilíndrico conectado a um reservatório através de uma transição suave. Portanto pode-se esperar que na seção de entrada o perfil de velocidades seja essencialmente homogêneo (uniforme na seção).

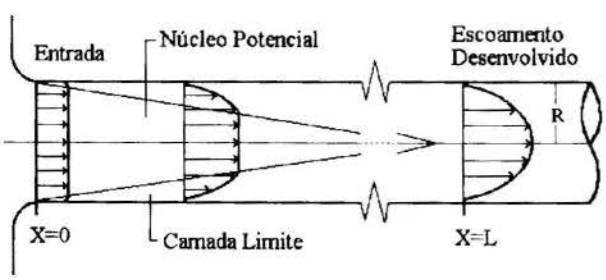


Figura 1 - Evolução do perfil de velocidades na região de entrada de um duto circular.

A velocidade longitudinal genérica foi adimensionalizada obtendo-se $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})=u(x,r)/U$. Os valores limites para a velocidade axial na região de entrada são:

$$x=0 \qquad \bar{u}=1$$

$$x\geq L \qquad \bar{u}=2(1-\bar{r}^2)$$

Expressando-se os perfis em x=0 e x=L, em termos de séries de Fourier obtem-se:

$$\bar{u}_{x=o}=\sum(-1)^n\left(\frac{2}{\lambda_n}\right)COS(\lambda_n\bar{r}),\ em\ x=0 \qquad (4)$$

$$\bar{u}_{x=L}=\sum(-1)^n\left(\frac{2}{\lambda_n}\right)^3 COS(\lambda_n\bar{r}),\ em\ x\geq L \qquad (5)$$

Comparando a Eq. (4) com a Eq. (5) observa-se que as duas representações diferem apenas no expoente do parêntese, $\left(2/\lambda_n\right)$. Com a condição de velocidade nula na parede do duto, encontra-se para λ_n: $\lambda_n=\left(2n+1/2\right)\pi$. A partir da análise e comparação entre as séries dadas pelas Eq. (4) e Eq. (5), é possível generalizar o campo de velocidade através da expressão:

$$\bar{u}(\bar{x},\bar{r})=\sum(-1)^n\left(\frac{2}{\lambda_n}\right)^k COS(\lambda_n\bar{r}^{(3-k)m+1}) \qquad (6)$$

Para que as funções estabelecidas pela Eq. (6) satisfaçam a equação integral da continuidade (1) deve-se calcular inicialmente as funções peso, P(x) que acompanharão as funções correspondentes. As funções peso são obtidas a partir da equação integral:

$$P(k)=(1/2)\left[\int_0^1\sum(-1)^n\left(\frac{2}{\lambda_n}\right)^k COS(\lambda_n\bar{r}^{(3-k)m+1})\bar{r}\,d\bar{r}\right]^{(-1)}$$

Assim a Eq. (6) é reescrita na forma:

$$\bar{u}(\bar{x},\bar{r})=P(k)\sum(-1)^n\left(\frac{2}{\lambda_n}\right)^k COS(\lambda_n\bar{r}^{(3-k)m+1}) \qquad (7)$$

Nas figuras 2, 3, 4 e 5 são apresentados graficamente os valores de $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})$, conforme a Eq. 7 para diversos valores de k e respectivamente para m=0, m=1, m=2 e m=3. Uma análise da representação gráfica da Eq. 7 para m=0 na figura 2, revela que para valores iniciais de k, o perfil de velocidades na forma de patamar (núcleo potencial) não é preservado, apresentando-se com forma ligeiramente curva em toda extensão.

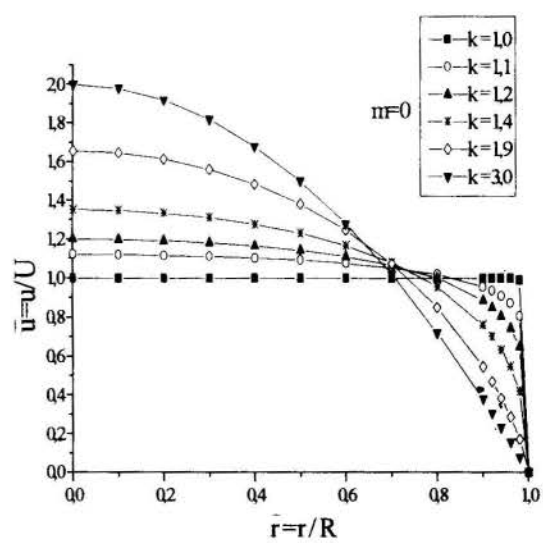


Figura 2 - Gráfico de $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})$ para valores de k, com m=0.

A representação gráfica da Eq. (7) para m=1 na figura 3, apresenta uma acentuada preservação de patamar nas vizinhanças da entrada do duto, correspondentes a um núcleo potencial. Da mesma forma observa-se este efeito nas figuras 4 e 5, onde tem-se a representação gráfica da Eq. (7) para m=2 e m=3, respectivamente. Como evidências experimentais existentes reforçam a existência de um núcleo potencial no escoamento na região de entrada, acredita-se que as expressões estabelecidas para $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})$ com valores de "m" maiores que 0 sejam mais satisfatórias para na modelagem do escoamento.

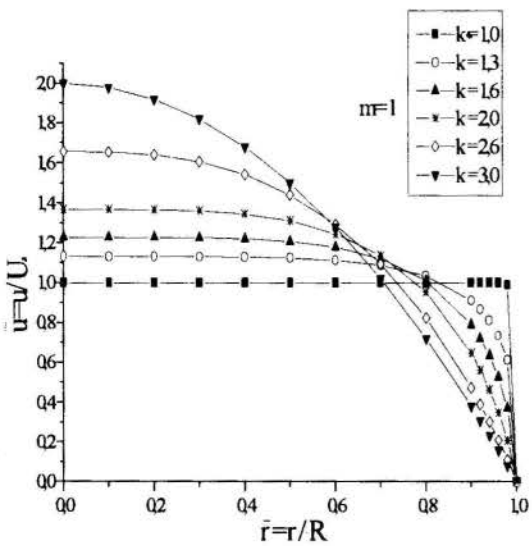


Figura 3 - Gráfico de $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})$ para valores de k, com m=1.

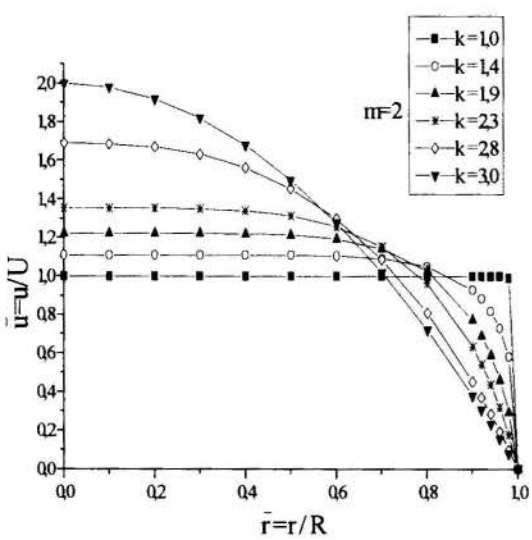


Figura 4 - Gráfico de $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})$ para valores de k, com m=2.

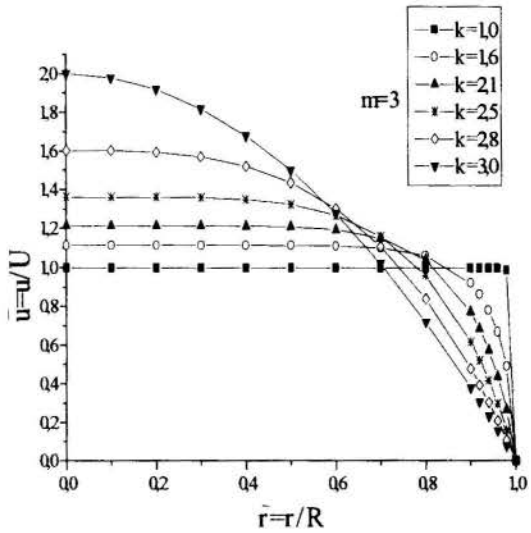


Figura 5 - Gráfico de $\bar{u}(\bar{x},\bar{r})$ para valores de k, com m=3.

O perfil de evolução das funções provenientes da equação (7) e representadas nas figuras anteriores, representarão a velocidade na região de entrada quando ficar determinada a função k(x). Para isso utiliza-se neste trabalho a técnica conhecida na literatura (Campbell and Slaterry, 1963), como método integral de solução. O procedimento requer isolar o gradiente de pressão da equação integral do movimento e substituir na equação integral da energia mecânica, para obter-se:

$$\frac{d}{d\bar{x}}\left[2\int_0^1 \bar{u}^2\,\bar{r}\,d\bar{r}-\int_0^1 \bar{u}^3\,\bar{r}\,d\bar{r}\right]=2\left.\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{r}}\right|_{\bar{r}=1}+\ldots$$

$$\ldots+2\int_0^1\left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{r}}\right)^2\bar{r}\,d\bar{r} \qquad (8)$$

A Eq. (8) pode ser reescrita após algumas operações algébricas na forma:

$$d\bar{x}=\left[\frac{4\int_0^1 \bar{u}\frac{d\bar{u}}{d\bar{k}}\,\bar{r}\,d\bar{r}-3\int_0^1 \bar{u}^2\frac{d\bar{u}}{d\bar{k}}\,\bar{r}\,d\bar{r}}{2\left.\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{r}}\right|_{\bar{r}=1}+2\int_0^1\left(\frac{\partial\bar{u}}{\partial\bar{r}}\right)^2\bar{r}\,d\bar{r}}\right]d\bar{k} \qquad (9)$$

Integrando simultaneamente os dois membros da Eq. (9) tem-se:

$$\bar{x} = \int_1^k \left[\frac{4\int_0^1 \bar{u}\frac{d\bar{u}}{dk}\bar{r}\,d\bar{r} - 3\int_0^1 \bar{u}^2 \frac{d\bar{u}}{dk}\bar{r}\,d\bar{r}}{2\left.\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}}\right|_{\bar{r}=1} + 2\int_0^1 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}}\right)^2 \bar{r}\,d\bar{r}} \right] dk \quad (10)$$

Substituindo na Eq. (10) a função proposta para modelagem dos perfis de velocidade, dada pela Eq. (7),. e desenvolvendo as derivadas e integrais existentes, encontra-se uma equação integral com a qual determina-se a função k(x). A equação integral que tem a forma: $\bar{x} = \int_1^k (\textit{função de } k)\, dk$, é integrada numéricamente variando-se o valor de "k" para toda região de entrada e especificando-se o valor de "m".

A queda de pressão é calculada através da equação integral da energia mecânica. Apresenta-se a seguir os resultados obtidos, e é apreciado o potencial desta proposta.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na figura 6 são apresentados os resultados da modelagem deste trabalho, para os perfis de velocidade na posição central do duto. Os valores são provenientes do cálculo para diferentes valores do parâmetro de modelagem "m" presente na Eq. (7).

Observa-se no gráfico da figura 6 que a solução obtida para m=0 apresenta um crescimento acentuado da velocidade em posições iniciais da região de entrada. Neste caso o limite de velocidade adimensional no centro do duto ($\bar{u}$ =2) é alcançado em valores da posição axial menores que das outras soluções, que correspondem a valores de "m" maiores que zero. Dessa forma, o comportamento dos resultados da velocidade obtidos para m=0 na região mais próxima da entrada, é acentuadamente diferente daqueles obtidos para m=1,2,3 e 4.

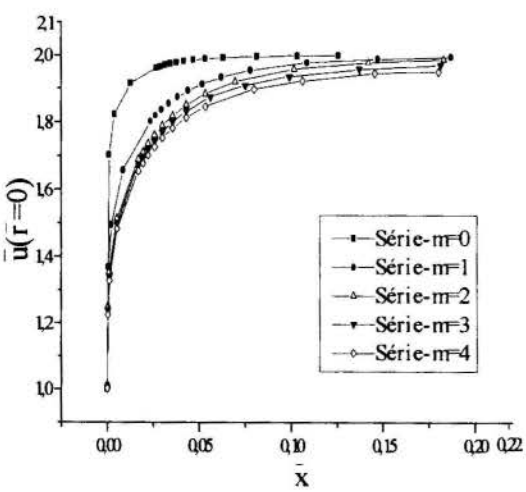


Figura 6 - Gráfico da velocidade axial na posição radial, $\bar{r}$ = 0,0. Resultados da modelagem.

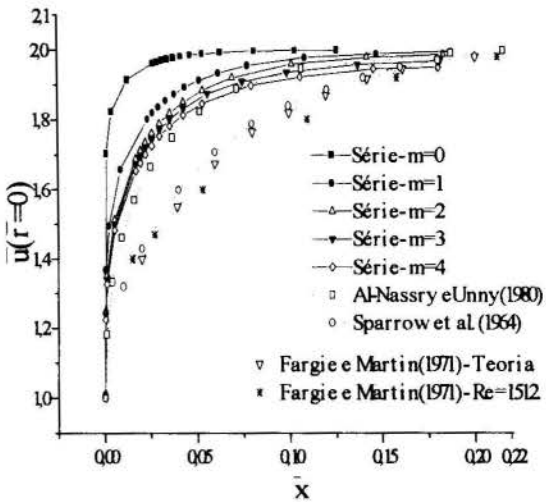


Figura 7 - Gráfico da velocidade axial na posição radial, $\bar{r}$ = 0,0. Comparação com outras investigações da literatura.

Na figura 7 são comparados os resultados da modelagem deste trabalho com outros da literatura. As investigações teóricas de Fargie e Martin (1971) e Al-Nassry e Unny (1980) apresentam soluções aproximadas para os perfis de velocidade, enquanto que a investigação de Sparrow et al. (1964) apresenta uma solução exata para o campo de velocidade, a partir da linearização da equação da quantidade de movimento. A investigação de Fargie e Martin (1971) também apresenta resultados de uma análise experimental. Na comparação realizada na figura 7, observa-se que a solução deste trabalho obtida para m=4 é a mais próxima das soluções da literatura. Em particular os resultados da investigação de Al-Nassry e Unny (1980) estão em bom acordo com os deste trabalho para m=4, sendo coincidentes para posições axiais superiores a 0,05.

Na figura 8 são comparados os resultados da modelagem deste trabalho para m=1 e m=4 com outros da literatura. Os resultados provenientes da solução para m=4 são os mais próximos dos da literatura. Há boa concordância com os resultados da análise variacional de Tao e Gupta (1972). Outros resultados comparados são devidos a análise experimental de Restoko (Apud Comini et al., 1980), a investigação numérica de elementos finitos de Comini et al. (1980), e a da investigação de Campbell e Slaterry (1963), que trata-se de uma solução aproximada para os perfis de velocidade através de polinômios.

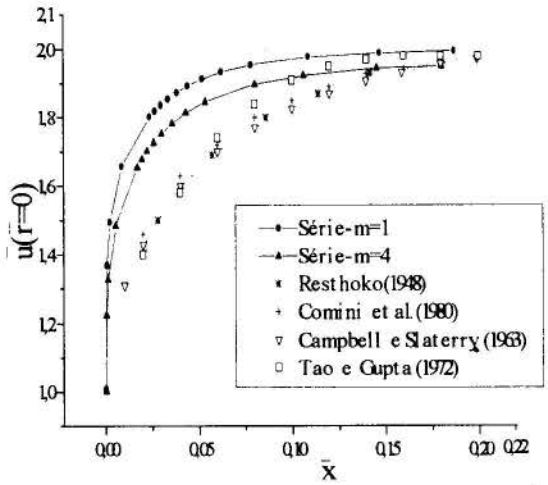


Figura 8 - Gráfico da velocidade axial na posição radial, $\bar{r}$ = 0,0. Comparação com outras investigações da literatura.

Na figura 9 são apresentados os resultados da modelagem deste trabalho, para os perfis de velocidade na posição intermediária do duto, ($\bar{r}=0,4$). Os valores são provenientes do cálculo para valores do parâmetro de modelagem, m=1 e m=4. Observa-se que há boa aproximação dos resultados deste trabalho com os da literatura, principalmente para posições axiais superiores que 0,05. Os resultados de Comini et al. (1980) são maiores que os deste trabalho para posições axiais maiores que 0,12.

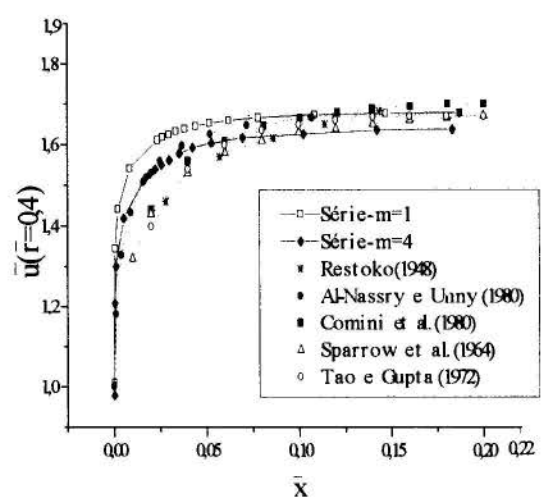


Figura 9 - Gráfico da velocidade axial na posição radial, $\bar{r}$ = 0,4. Comparação com outras investigações da literatura.

Nas figuras 10 e 11 são apresentados os resultados da modelagem deste trabalho, para os perfis de velocidade em posições radiais próximas a parede do duto, respectivamente $\bar{r}=0,8$ e $\bar{r}=0,9$. Na figura 10 observa-se que os resultados da modelagem para m=0, são acentuadamente diferentes em posições próximos a entrada do duto, em comparação principalmente com resultados de m=4. Observa-se nas figuras que há melhor concordância deste trabalho com os da investigação de Al -Nassry e Unny (1980). O ajuste com os resultados da linearização de Sparrow et al. (1964) é melhor no caso da figura 11, em que a posição radial considerada é 0,9.

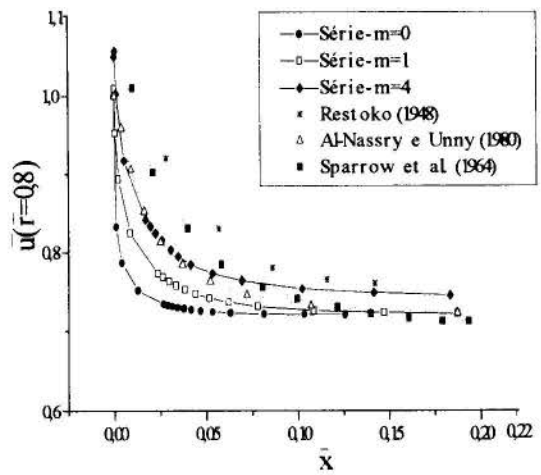


Figura 10 - Gráfico da velocidade axial na posição radial, $\bar{r}$ = 0,8. Comparação com outras investigações da literatura.

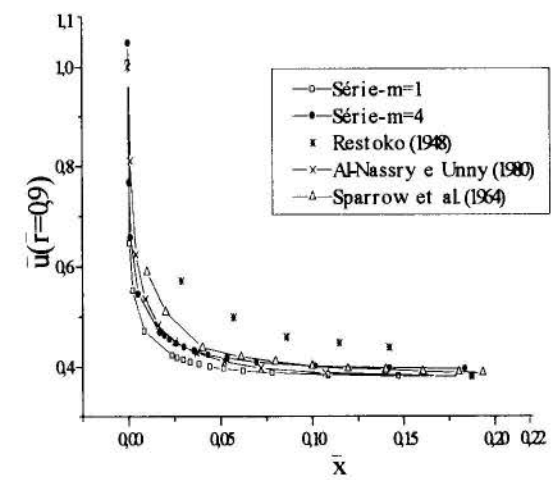


Figura 11 - Gráfico da velocidade axial na posição radial, $\bar{r}$ = 0,9. Comparação com outras investigações da literatura.

Na Tabela 1 são apresentadas as diferenças percentuais máximas (Máx.) e mínimas (Mín.) entre os resultados deste trabalho para m=1 e m=4, com os de Restoko (Apud Comini et al., 1980) e Sparrow et al. (1964). Na comparação foram consideradas as posições radiais $\bar{r}$ = 0,0 e $\bar{r}$ = 0,4. As diferenças percentuais foram calculadas através da razão entre, o

valor da diferença entre este trabalho e outros considerados, e o menor valor entre eles. Na maioria dos resultados apresentados na tabela, as menores diferenças percentuais são observadas para o caso em que m=4.

Tabela 1 - Comparação entre as diferenças percentuais dos resultados deste trabalho com outros da literatura.

Literatura Este Trabalho	Restoko (1948) m=1	 m=4	Sparrow et al. (1964) m=1	 m=4
$\bar{r}$ = 0,0 - Min.(%)	0,5	3,5	2,3	0,0
- Máx.(%)	21,6	16,3	25,4	16,8
$\bar{r}$ = 0,4 - Min.(%)	0,4	0,4	0,4	0,3
- Máx.(%)	11,2	6,2	17,2	10,3

Ao analisar as diferenças observadas entre os resultados deste trabalho e os da literatura, na comparação realizada para os perfis de velocidade, deve-se considerar as técnicas diferentes de modelagem e formulação do problema.

Os poucos resultados experimentais encontrados na literatura não utilizaram de tecnologias recentes de medidas, e não são suficientes para avaliar alguma diferença observada entre os resultados aproximados das modelagens.

Na comparação de resultados teóricos aproximados, deve-se considerar alguns efeitos presentes em escoamentos de entrada, como a geometria de entrada e perturbações no escoamento laminar, capazes de alterar os valores de velocidade ao longo do duto.

CONCLUSÕES

Com a análise dos resultados obtidos por esta modelagem pode-se concluir:

- a forma com que se apresentaram os resultados da velocidade a partir da Eq. (7) para m=0 (séries de Fourier), não estão em bom acordo com resultados de outras investigações da literatura. Portanto acredita-se que esta função não modela adequadamente o escoamento na região de entrada;
- foram satisfatórias as propostas de modelagem provenientes da Eq. (7) para outros valores de "m" maiores que 0 (séries de Fourier modificadas), ou seja, m=1, m=2, m=3 e m=4, também através da ponderação introduzida sobre a variável radial. Os resultados estão de acordo com outras investigações da literatura, produzindo uma modelagem adequada;
- acredita-se que este trabalho valida a técnica proposta para a descrição dos perfis de velocidades na região de entrada através de séries modificadas de Fourier.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Al-Nassry, S.A. and Unny, T., 1980. "Developing laminar flow in the inlet lenght of a smooth pipe". Applied Science Research, v.A36, n. 5-6, p. 313-332.

Campbell,W.D. and Slaterry, J.C., 1963. "Flow in the entrance of a tube". Journal of Basic Engineering, v. 85, n. 3, p. 41-46.

Comini, G., Giudici, S. and Strada, M., 1980. "Finite element analysis of laminar flow in the entrance region of ducts". International Journal for Numerical Methods in Engineering, v. 15, p. 507-517.

Fargie, D. and Martin, B. W., 1971. "Developing laminar flow in a pipe of circular cross-section". Proceeding Royal Society of London, v. A321, p. 461-476.

Fontes, S. R., 1991. "Desenvolvimento de uma técnica matemática para modelagem do escoamento laminar na região de entrada de um duto circular" .São Carlos: 164 p. Tese (Mestrado), S.H.S. - E.E.S.C./USP.

Gupta, R.C. and Agarwal, R.P., 1993. "Non-newtonian fluid flow development in a circular pipe". Fluid Dynamics Research, v. 12, p. 203-213.

Henriques, A., 1988. "Investigação experimental da perda de carga em escoamentos assintoticamente laminares em dutos". São Carlos: 107 p. Tese (Mestrado), S.H.S. - E.E.S.C./USP.

Langhaar, H. L., 1942. "Steady flow in the Transition length of a straight tube". Journal Applied of Mechanics, n. 9, p. A55-A58.

Lee, T. S., 1994. "Steady laminar fluid flow through variable constrictions in vascular tube". Journal of Fluids Engineering, v. 116, march, p. 66-71.

Mohanty, A. K. and Asthana, S. B. L., 1978. "Laminar flow in the entrance region of a smooth pipe". Journal of Fluid Mechanics, v. 90, part 3, p. 433-447.

Rajaratnam, N., Katopodis, C. and Sabur, M.A., 1991. "Entrance region of circular pipes flowing partly full". Journal of Hydraulics Research, v.29, n.5, p. 685-698.

Singh, M. P., Sinha, P. C. and Agarwal, M., 1978. "Flow in the entrance of the aorta". Journal of Fluid Mechanics, v. 87, part 1, p. 97-120.

Sparrow, E. M., Lin, S. H. and Lundgren, T. S., 1964. "Flow development in the hydrodynamic entrance region of tubes and ducts". The Physics of Fluids, v.7, p. 338-347.

Tao, L.N. and Gupta, S.D. "Variational analysis of the flow development in the region of circular tubes and parallel-plate channels". Proceedings of the 13th Midwestern Mechanics Conference: v. 7, n.19, p. 247-263, 1972.

Tatsumi, T., 1952. "Stability of the laminar inlet-flow prior to the formation of Poiseulli regime, I and II". Journal of the Physical Society of Japan, v.7, n.5, p. 489-502.

ABSTRACT

The permanent laminar flow in the entrance region of a circular duct is modeled using an original technique. A set of approximate functions is proposed for the velocity profiles in the entrance region, based upon the use of expansion as Fourier series. Results for the velocity profiles and for the longitudinal pressure drops, determined from the approximate functions in an integral formulation of the conservation equations are presented graphically. The results show good agreeement with the literature.

A COMPARISON OF INTEGRAL TRANSFORM STRATEGIES FOR SOLVING THE BOUNDARY LAYER EQUATIONS

E. Figueira da Silva*, J.S. Pérez Guerrero and R.M. Cotta**
Mechanical Engineering Department
Universidade Federal do Rio de Janeiro
EE/COPPE/UFRJ 21945-970 - RJ - Brazil

*Radioactive Waste Department
Comissão Nacional de Energia Nuclear
22294-900 - Rio de Janeiro - RJ - Brazil

**Mechanical Engineering and Materials Department
Instituto Militar de Engenharia
22290-270 - Rio de Janeiro - RJ - Brazil

SUMMARY

A thorough comparative analysis is performed of three solution strategies for the boundary layer equations in the primitive variables formulation and one strategy in the streamfunction-only formulation, by making use of the integral transform method. The aim is to determine the relative advantages of each strategy, in terms of convergence rates, computational cost and analytical involvement. This hybrid numerical-analytical approach is widely known as being able of providing benchmark results under user-prescribed accuracy targets and as validation tool for purely numerical schemes. The present work shows that the appropriate choice of the solution may provide substantial gains on convergence rates and, thereof, reduced computational cost.

INTRODUCTION

Along the last few years, a hybrid numerical-analytical method has been developed, the so-called Generalized Integral Transform Technique (GITT), as reviewed by Cotta (1993, 1994a,b), which combines the analytical formalism of the classical integral transform method with the attractive feature of automatically controling the error in the numerical solution of partial differential systems. This approach provides numerical results to within an user prescribed accuracy target, offering a powerful benchmark tool for nonlinear problems. A summary of the various contributions on this technique related to the present subject was done by Cotta (1994a). More recently, Figueira da Silva (1994) and Figueira da Silva et al. (1996) observed that the integral transform solution of the boundary layer equations, when written in the streamfunction-only formulation, offers a better computational performance than the primitive variables version.

The present paper is aimed at criteriously revising the works of Machado (1992), Machado and Cotta (1994), Cotta and Carvalho (1991) and Carvalho et al. (1993), inspecting the best way of solving the boundary layer equations for internal flow through the GITT, as well as at establishing more definitive benchmark results for this class of problems.

ANALYSIS

Steady incompressible laminar flow of a newtonian fluid, developing within a parallel plates channel is studied. The channel is assumed infinite in the z direction and semi-infinite in the direction of positive x. The fluid enters the channel with an uniform velocity profile. The following analysis is made separately for the two alternative formulations, namely, the primitive variables and the streamfunction-only formulations.

Primitive Variables Formulation

Within the range of validity of the boundary layer hypothesis, the continuity, x-momentum and y-momentum equations in the primitive variables formulation (Schlichting, 1979) for this problem are written in dimensionless form, respectively, as (Figueira da Silva, 1994):

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0\,, \qquad 0<y<1;\ x>0 \tag{1}$$

$$u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}=-\frac{dp}{dx}+\frac{1}{Re}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\,, \qquad 0<y<1;\ x>0 \tag{2}$$

$$\frac{dp}{dy}=0\,, \qquad 0<y<1;\ x>0 \tag{3}$$

with the following dimensionless boundary conditions:

$$\frac{\partial u(x,0)}{\partial y}=0; \quad v(x,0)=0 \tag{4a,b}$$

$$u(x,1)=0; \quad v(x,1)=0 \tag{4c,d}$$

$$u(0,y)=1 \tag{4e}$$

The pressure gradient, which plays the role of a source term in the x-momentum equation, generates a convergence retardation in the GITT solution of the above equations. A separation (filtering solution) of the fully developed longitudinal velocity field has been proposed by Machado and Cotta (1994), so as to diminish this effect. According to that work, the filter has provided a convergence acceleration and, associated to an adaptive procedure, has significantly reduced the overall computational cost, as explained below. The longitudinal velocity field is separated into two portions:

$$u(x,y)=\eta u_\infty(y)+u^*(x,y) \tag{5}$$

The first form in the right hand side of eq.(5) is the fully developed flow contribution. The η coefficient was introduced to trace the filter contribution in the resulting equations, assuming the values of 1 or 0, as the filter is considered or not. If eq.(5) is substituted just on the right side of equation (2), the way the filter will act becomes evident:

$$u\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial u}{\partial y}=\left[-\frac{dp}{dx}+\frac{\eta}{Re}\frac{d^2u_\infty}{dy^2}\right]+\frac{1}{Re}\frac{\partial^2 u^*}{\partial y^2} \qquad (6)$$

which simplified for fully developed flow leads to the following equations for the calculation of u_∞:

$$-\left(\frac{dp}{dx}\right)_\infty+\frac{1}{Re}\frac{d^2u_\infty}{dy^2}=0 \qquad (7)$$

$$\frac{du_\infty(0)}{dy}=0\,; \quad u_\infty(1)=0 \qquad (8,9)$$

and the following analytic solution:

$$u_\infty(y)=\frac{3}{2}(1-y^2) \qquad (10)$$

The boundary conditions (4) may then be rewritten for u^* as:

$$\frac{\partial u^*(x,0)}{\partial y}=0; \qquad v(x,0)=0 \qquad (11a,b)$$

$$u^*(x,1)=0; \qquad v(x,1)=0 \qquad (11c,d)$$

$$u^*(0,y)=1-\eta\, u_\infty(y) \qquad (11e)$$

For the integral transform solution of equation (6), the appropriate eigenvalue problem is taken as:

$$\frac{d^2\Phi_i(y)}{dy^2}+\mu_i^2\Phi_i(y)=0 \qquad (12a)$$

with the following boundary conditions:

$$\frac{d\Phi_i(0)}{dy}=0\,;\ \Phi_i(1)=0 \qquad (12b,c)$$

This Sturm-Liouville problem has an analytical explicit solution (Özisik, 1980) given by

$$\Phi_i(y)=\cos(\mu_i y) \qquad (13a)$$

while the eigenvalues and norms are

$$\mu_i=(2i-1)\frac{\pi}{2}, \quad N_i=\frac{1}{2}\ ;\ i=1,\,2,\,\ldots \qquad (13b,c)$$

The normalized eigenfunction is defined as:

$$\overline{\Phi_i}(y)=\frac{\Phi_i(y)}{N_i^{1/2}} \qquad (14)$$

and the definition of the integral transform pair becomes:

$$\overline{U_i}(x)=\int_0^1\overline{\Phi_i}(y)u^*(x,y)dy\ ,\ \text{transform} \qquad (15)$$

$$u^*(x,y)=\sum_{i=1}^{\infty}\overline{\Phi_i}(y)\overline{U_i}(x)\ ,\quad \text{inverse} \qquad (16)$$

The pressure gradient can be handled in two ways through integration of the momentum equation (2). Both possibilities will be shown below and will be arbitrarily named **first** and **second** ways. Following, the two strategies will be quantitatively compared.

Pressure Gradient: First Way

The first way of handling the pressure gradient comes from the integration of equation (6) in the transversal y coordinate, over the whole channel cross section:

$$-\frac{dp}{dx}=2\int_0^1 u\frac{\partial u^*}{\partial x}dy-\frac{1}{Re}\frac{\partial u^*(x,1)}{\partial y}-\frac{\eta}{Re}\frac{du_\infty(1)}{dy} \qquad (17)$$

Substituting back the inversion formula (19):

$$-\frac{dp}{dx}=2\sum_{k=1}^{\infty}\left(\eta H_k^*+\overline{U_k}\right)\frac{d\overline{U_k}}{dx}+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\mu_k^2}{Re}F_k(0)\overline{U_k}+\frac{3}{Re} \qquad (18)$$

where: $H_k^*=\int_0^1 u_\infty(y)\overline{\Phi_k}(y)dy$ (19)

Pressure Gradient Treatment: Second Way

A second way of eliminating the longitudinal pressure gradient was attempted, aiming the automatic satisfaction of the global continuity, a more involved strategy than task to achieve for the first way of calculation. Integrating equation (2) twice:

$$u(x,y)=Re\left[\frac{1}{2}(1-y^2)\left(-\frac{dp}{dx}\right)-2\int_y^1\int_0^{y'}u\frac{\partial u}{\partial x}dy''dy'-\int_y^1 uvdy'\right] \qquad (20)$$

Eq.(20) provides a "corrector" for the longitudinal velocity component; after employing the inversion formula (19):

$$u(x,y)=Re\left\{\frac{1}{2}(1-y^2)\left(-\frac{dp}{dx}\right)+\sum_{k=1}^{\infty}\left[\eta\mathsf{H}_k(y)+\sum_{j=1}^{\infty}\mathsf{G}_{jk}(y)\overline{U_j}\right]\frac{d\overline{U_k}}{dx}\right\} \qquad (21)$$

where:

$$\mathsf{H}_k(y)=-2\int_y^1\int_0^{y'}u_\infty(y'')\overline{\Phi_k}(y'')dy''dy'-\int_y^1 u_\infty(y')F_k(y')dy' \qquad (22)$$

$$\mathsf{G}_{jk}(y)=-2\int_y^1\int_0^{y'}\overline{\Phi_j}(y'')\overline{\Phi_k}(y'')dy''dy'-\int_y^1\overline{\Phi_j}(y')F_k(y')dy' \qquad (23)$$

Integrating (20), the following equation for the pressure gradient is obtained, considering unitary mean velocity

$$-\frac{dp}{dx}=6\int_0^1\int_y^1\int_0^{y'}u\frac{\partial u}{\partial x}dy''dy'dy+3\int_0^1\int_y^1 uvdy'dy+\frac{3}{Re} \qquad (24)$$

Using the inversion formula in equation (24), the pressure gradient may be calculated from:

$$-\frac{dp}{dx}=\sum_{k=1}^{\infty}\left(\eta H_k+\sum_{j=1}^{\infty}G_{jk}\overline{U_j}\right)\frac{d\overline{U_k}}{dx}+\frac{3}{Re} \qquad (25)$$

where:

$$H_k=6\int_0^1\int_y^1\int_0^{y'}u_\infty(y'')\overline{\Phi_k}(y'')dy''dy'dy+3\int_0^1\int_y^1 u_\infty(y')F_k(y')dy'dy \qquad (26)$$

$$G_{jk}=6\int_0^1\int_y^1\int_0^{y'}\overline{\Phi_j}(y'')\overline{\Phi_k}(y'')dy''dy'dy+3\int_0^1\int_y^1\overline{\Phi_j}(y')F_k(y')dy'dy \qquad (27)$$

The ordinary differential equations system derived from the x-momentum equation is obtained through the application of the integral transform operator, $\int_0^1\overline{\Phi_i}(y)dy$, to each term of equation (6) and using the filtering (5) and inversion formula (16).

For the first way of treating the pressure gradient, the resulting differential system is:

$$\sum_{k=1}^{\infty}E_{ik}^*\frac{d\overline{U_k}}{dx}=\sum_{k=1}^{\infty}D_{ik}^*\overline{U_k} \qquad (28)$$

where

$$E_{ik}^*=\eta P_{ik}^*+\sum_{j=1}^{\infty}\left[A_{ijk}+B_{ijk}-2F_i(0)\delta_{jk}\right]\overline{U_j} \qquad (29)$$

$$D_{ik}^*=\frac{\mu_k^2}{Re}\left[F_i(0)F_k(0)-\delta_{ik}\right] \qquad (30)$$

$$P_{ik}^*=Q_{ik}^*-3S_{ik}-2\,F_i(0)H_k^* \qquad (31)$$

$$Q_{ik}^*=\int_0^1 u_\infty(y)\overline{\Phi_i}(y)\overline{\Phi_k}(y)dy \qquad (32)$$

$$S_{ik}=\int_0^1 y\overline{\Phi_i}(y)F_k(y)dy \qquad (33)$$

$$A_{ijk} = \int_0^1 \overline{\Phi_i}(y)\overline{\Phi_j}(y)\overline{\Phi_k}(y)dy \tag{34}$$

$$B_{ijk} = \int_0^1 \overline{\Phi_i}(y)\overline{\Phi_j'}(y)F_k(y)dy \tag{35}$$

Evaluating the pressure gradient through the second way, the ODE system then becomes:

$$\sum_{k=1}^{\infty} E_{ik}^{**}\frac{d\overline{U_k}}{dx} = \sum_{k=1}^{\infty} D_{ik}^{**}\overline{U_k} + \Phi_i^{**} \tag{36}$$

where:

$$E_{ik}^{**} = \eta P_{ik}^{**} + \sum_{j=1}^{\infty}\left[A_{ijk} + B_{ijk} - F_i(0)G_{jk}\right]\overline{U_j} \tag{37}$$

$$\Phi_i^{**} = \frac{3}{Re}(1-\eta)F_i(0) \tag{38}$$

$$P_{ik}^{**} = Q_{ik}^{*} - 3S_{ik} - F_i(0)H_k \tag{39}$$

The integral transformation of the boundary condition in the duct entrance (4.e), furnishes the following initial condition for systems (28), or (36):

$$\overline{U_i}(0) = F_i(0) - \eta H_i^{*} \tag{40}$$

Equations (38) or (36), and (40) form a non-linear initial value problem of infinitely many equations for the transformed velocity field. For numerical solution, these systems must be truncated to a sufficiently high order, N, such that convergence is attained to a prescribed global tolerance. Systems (28) and (36) may be written in truncated form as:

$$\sum_{k=1}^{N} E_{ik}^{*}(\overline{\mathrm{U}})\frac{d\overline{U_k}}{dx} = \sum_{k=1}^{N} D_{ik}^{*}\overline{U_k} \tag{41}$$

$$\sum_{k=1}^{N} E_{ik}^{**}(\overline{\mathrm{U}})\frac{d\overline{U_k}}{dx} = \sum_{k=1}^{N} D_{ik}^{**}\overline{U_k} + \Phi_i^{**} \tag{42}$$

Equations (41-42) form a stiff ordinary differential equations system. Subroutines are readily available use methods that handle stiff problems. In the present work, it was used the HSSODE subroutine from the BOEING library, which provides automatic local error control, that is kept within an user prescribed accuracy.

Streamfunction-Only Formulation

The dimensionless streamfunction for a two-dimensional flow is defined as:

$$\frac{\partial\psi}{\partial y} = u; \qquad \frac{\partial\psi}{\partial x} = -v \tag{43a,b}$$

It should be noticed that this formulation automatically satisfies the continuity equation (1). A scale analysis of the the vorticity transport equation derived from the Navier-Stokes equations (Schlichting, 1979) leads to the following boundary layer equation in the streamfunction-only formulation (Plotkin, 1982) of the boundary layer equations:

$$\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial^3\psi}{\partial x\partial y^2} - \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial^3\psi}{\partial y^3} = \frac{1}{Re}\frac{\partial^4\psi}{\partial y^4}; \quad 0<y<1; \quad x>0 \tag{44}$$

with boundary conditions

$$\psi(x,0) = 0; \qquad \frac{\partial^2\psi(x,0)}{\partial y^2} = 0; \tag{45a,b}$$

$$\psi(x,1) = 1; \qquad \frac{\partial\psi(x,1)}{\partial y} = 0; \tag{45c,d}$$

$$\psi(0,y) = y \tag{45e}$$

The streamfunction field may be separated into two portions, similarly to the primitive variables formulation. This time, filtering is mandatory, since the choice of the adequate auxiliary problem demands homogeneous boundary conditions in the y coordinate, to be eliminated in the integral transformation process:

$$\psi(x,y) = \psi_\infty(y) + \psi^{*}(x,y) \tag{46}$$

where $\psi_\infty(y)$ is the fully developed flow streamfunction, which may be obtained through integration of $u_\infty(y)$ or through application of this separation in equation (57), to yield:

$$\psi_\infty(y) = \frac{3}{2}\left(y - \frac{y^3}{3}\right) \tag{47}$$

Then, the problem corresponding to eq.(44), in terms of $\psi^{*}(x,y)$, becomes:

$$\left[\frac{d\psi_\infty}{dy}\frac{\partial^3\psi^{*}}{\partial x\partial y^2} - \frac{d^3\psi_\infty}{dy^3}\frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\right] + \left[\frac{\partial\psi^{*}}{\partial y}\frac{\partial^3\psi^{*}}{\partial x\partial y^2} - \frac{\partial\psi^{*}}{\partial x}\frac{\partial^3\psi^{*}}{\partial y^3}\right] = \frac{1}{Re}\frac{\partial^4\psi^{*}}{\partial y^4} \tag{48}$$

with the following boundary conditions:

$$\psi^{*}(x,0) = 0; \qquad \frac{\partial^2\psi^{*}(x,0)}{\partial y^2} = 0; \tag{49a,b}$$

$$\psi^{*}(x,1) = 0; \qquad \frac{\partial\psi^{*}(x,1)}{\partial y} = 0; \tag{49c,d}$$

$$\psi^{*}(0,y) = y - \psi_\infty(y) \tag{49e}$$

The appropriate auxiliar problem for integral transformation of eq.(48) is discussed in the work of Pérez Guerrero and Cotta (1995); and given by:

$$\frac{d^4Y_i(y)}{dy^4} = \varphi_i^4 Y_i(y); \qquad i = 1,2,\ldots \tag{50a}$$

with the following boundary conditions:

$$Y_i(0) = 0; \qquad \frac{d^2Y_i(0)}{dy^2} = 0 \tag{50b,c}$$

$$Y_i(1) = 0; \qquad \frac{dY_i(1)}{dy} = 0 \tag{50d,e}$$

This problem has the following analytical solution:

$$Y_i(y) = \frac{\sin(\varphi_i y)}{\sin(\varphi_i)} - \frac{\sinh(\varphi_i y)}{\sinh(\varphi_i)}; \qquad i = 1,2,\ldots \tag{51a}$$

where the eigenvalues are obtained from the following transcendental equation:

$$\tanh(\varphi_i) = \tan(\varphi_i); \qquad i = 1,2,\ldots \tag{51b}$$

The inverse-transform pair is then defined as:

$$\overline{\Psi_i}(x) = \int_0^1 Y_i(y)\psi^{*}(x,y)dy; \qquad \text{transform} \tag{52}$$

$$\psi^{*}(x,y) = \sum_{i=1}^{\infty} Y_i(y)\overline{\Psi_i}(x); \qquad \text{inverse} \tag{53}$$

The ODE system derived from the vorticity transport equation is obtained through aplication of the operator $\int_0^1 Y_i(y)dy$ on equation (48). Employing the inversion formula (53), the eigenfunctions' orthogonality property and conveniently grouping the terms, we come to the following ODE system:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \mathsf{E}_{ik}^{*}\frac{d\overline{\Psi_k}}{dx} = \sum_{k=1}^{\infty} \mathsf{D}_{ik}^{*}\overline{\Psi_k} \tag{54}$$

where:

$$E^*_{ik} = P_{ik} + \sum_{j=1}^{\infty} C_{ijk} \overline{\Psi_j} \tag{55}$$

$$D^*_{ik} = \frac{\varphi_k^4}{Re}\delta_{ik}\,; \qquad P_{ik} = B_{\infty ik} - \psi'''_{\infty}\delta_{ik} \tag{56-57}$$

$$B_{\infty ik} = \int_0^1 \psi'_{\infty} Y_i(y) Y_k''(y) dy \tag{58}$$

$$C_{ijk} = \int_0^1 Y_i(y) Y_j'(y) Y_k''(y) dy - \int_0^1 Y_i(y) Y_j''(y) Y_k(y) dy \tag{59}$$

The integral transformation of the streamfunction field in the duct entrance gives the following initial condition for the transformed system:

$$\overline{\Psi_i}(0) = \frac{1}{2}\int_0^1 \left(y^3 - y\right) Y_i(y) dy \tag{60}$$

System (54, 60) consists of a nonlinear initial value problem. This ODE system is numerically solved and, therefore, must be truncated to a sufficiently high order, N.

The truncated version of system (54) is written as:

$$\sum_{k=1}^{N} E^*_{ik}\left(\overline{\Psi}\right)\frac{d\overline{\Psi_k}}{dx} = \sum_{k=1}^{N} D^*_{ik}\,\overline{\Psi_k} \tag{61}$$

Equation (61) may also be also highly stiff, due to the very distinct decay rates of the transformed potentials. HSSODE (BOEING library) and DIVPAG (IMSL library, 1989) subroutines were used to solve the aforementioned differential systems.

The order of truncation required for convergence to a certain accuracy may also be automatically determined by the algorithm, through the so called Adaptive Procedure (Cotta, 1993).

RESULTS AND DISCUSSION

Numerical results obtained though the strategies analysed in the previous section are discussed below. The computational code was written in FORTRAN 77 and implemented in a 486 DX2 - 66 MHz, running under OS/2 environment, as well as in a CRAY Y-MP2E/232 supercomputer with two main processors, running under UNIX. Results were obtained for $Re = 2{,}000$, but it should be noted that the following X^+ dimensionless coordinate make the results, in terms of X^+, independent of Reynolds number:

$$X^+ = 10^3 \frac{x}{D_h Re_h} \tag{62}$$

All the primitive variables formulation strategies were computed on the supercomputer CRAY with a 10^{-7} accuracy target in the HSSODE subroutine, while the streamfunction case could be calculated on the microcomputer, with a 10^{-6} tolerance in the DIVPAG subroutine.

The first step consists on a convergence analysis of the primitive variables formulation for the first way of calculation of the pressure gradient. Table 1 shows the longitudinal velocity component convergence, in the duct centerline ($y = 0$) for distinct positions along the flow development, without filtration of the velocity field. These results repeat the analysis done by Carvalho et al. (1993).

The slow convergence in the velocity field also affects the longitudinal mean velocity, that has a discrepancy from the theoretical value of up to 0.6% for $N = 60$ and reaches 4% with 10 terms, as can be seen in table 2.

The mean velocity for this way of calculation has an interesting behavior, as shows figure 1. Its values in the developed flow are greater than unity, contrary to what occurs in flow development. An interesting observed result is that unitary values occur near to the position were the flow reaches full development.

Table 1 - Convergence of the longitudinal velocity in duct centerline; total CPU time in CRAY (Primitive Variables, first way, without filter)

X^+	N=10	N=20	N=40	N=60	N=80	N=100
0.375	1.0962	1.1117	1.1188	1.1211	1.1221	1.1228
0.75	1.1471	1.1617	1.1684	1.1705	1.1715	1.1721
1.5	1.2175	1.2311	1.2374	1.2394	1.2403	1.2409
2.5	1.2856	1.2983	1.3043	1.3062	1.3072	1.3077
5.0	1.3896	1.4010	1.4065	1.4083	1.4092	1.4097
12.5	1.4750	1.4832	1.4872	1.4885	1.4891	1.4895
62.5	1.5332	1.5166	1.5083	1.5055	1.5041	1.5033
90	1.5603	1.5300	1.5150	1.5100	1.5075	1.5060
CPU(s)	0.51	2.1	12.6	47.6	126.2	305.8

Table 2 - Mean velocity convergence (Primitive Variables, first way, without filter)

X^+	N=20	N=40	N=60	N=80	N=100
0.375	0.98946	0.99476	0.99651	0.99739	0.99791
0.75	0.98996	0.99501	0.99668	0.99751	0.99801
1.5	0.99066	0.99536	0.99691	0.99769	0.99815
2.5	0.99135	0.99570	0.99714	0.99786	0.99809
5.0	0.99262	0.99634	0.99757	0.99818	0.99854
12.5	0.99541	0.99772	0.99849	0.99887	0.99910
62.5	1.0118	1.0059	1.0039	1.0029	1.0024
90	1.0279	1.0104	1.0069	1.0052	1.0041

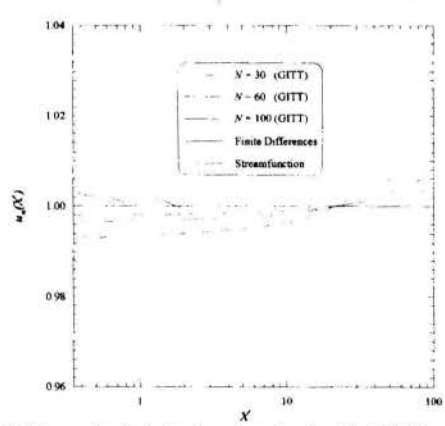


Figure 1- Mean velocity behavior along the duct for GITT and finite differences (Shah and London, 1978). Primitive variables, first way, without filter

Filtering of the velocity field was implemented in order to accelerate convergence, as indicated by Machado (1992). However, one may verify by inspection of table 3 below that convergence is not significantly affected by filtering. Notwithstanding, a much better behavior for the mean velocity was obtained for this case, still with a slow, convergence but uniformly to unity, with no significant variation along the duct, as may be verified in table 4 and figure 2. The table shows how the mean velocity expansion has a better convergence for the fully developed flow in the case with filter.

In fact, Machado's (1992) results show that he has presented used u/u_m, in spite of u. His convergence analysis was also performed for the quantity u/u_m. For the primitive variables formulation, u/u_m shows a faster convergence and a better agreement with finite differences results even with lower truncation orders, because of error cancelation.

Table 3 - Convergence of the longitudinal velocity in the center of the duct. Comparison with the finite differences results of Bodoia (1959), after Shah and London (1978). Primitive Variables, first way, with filter.

X^+	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	Fin. Diff.
0.375	1.1116	1.1188	1.1210	1.1221	1.1244
0.75	1.1614	1.1683	1.1704	1.1715	1.1767
1.5	1.2305	1.2371	1.2392	1.2402	1.2463
2.5	1.2975	1.3039	1.3059	1.3069	1.3121
5.0	1.3992	1.4056	1.4077	1.4087	1.4111
12.5	1.4777	1.4844	1.4867	1.4878	1.4903
62.5	1.4863	1.4932	1.4955	1.4967	1.4999
90	1.4861	1.4932	1.4955	1.4966	1.5000
CPU(s)	28.0	159.7	521.6	1494.1	-

Table 4 - Convergence of the mean velocity. Comparison to the finite difference results of Bodoia (1959), after Shah and London (1978). Primitive variables, first way, with filter.

X^+	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$	Fin. Diff.
0.375	0.98929	0.99468	0.99646	0.99735	1.003
0.75	0.98963	0.99485	0.99657	0.99743	1.001
1.5	0.99002	0.99504	0.99670	0.99753	1.001
2.5	0.99032	0.99519	0.99680	0.99761	1.000
5.0	0.99069	0.99538	0.99693	0.99770	1.000
12.5	0.99094	0.99552	0.99702	0.99777	1.000
62.5	0.99082	0.99549	0.99701	0.99777	1.000
90	0.99074	0.99547	0.99701	0.99776	1.000

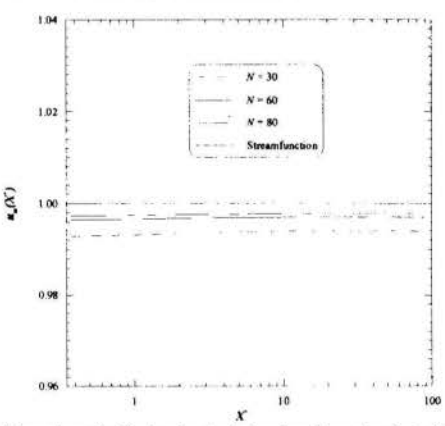


Figure 2 - Mean longitudinal velocity behavior along the duct. Primitive Variables, first way, with filter.

Finite differences solution of the boundary layer equations (Bodoia and Osterle, 1961) considers the global continuity equation as the third equation to complete the boundary layer formulation. The finite differences scheme corrects the pressure gradient so as to preserve the global continuity. This was the concept that lead to the second way of calculation of the pressure gradient through the GITT. In this way, the global continuity is included in the pressure gradient calculation, which is corrected so as to automatically satisfy continuity, as shown in the previous section.

The velocity field, now obtained from the corrected velocity equation (21), doesn't have, however, its rate of convergence significantly altered in relation to the first way, as may be verified by comparing tables 5 and 3. The results obtained for this second way were not completely satisfactory, since the main goal of accelerating convergence was not attained, even though global continuity has been satisfied.

Table 5 - Longitudinal velocity convergence in center of duct. Total CPU time in CRAY. Primitive Variables, second way, with filter.

X^+	$N = 10$	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$	$N = 80$
0.375	1.1382	1.1327	1.1293	1.1280	1.1273
0.75	1.1886	1.1824	1.1787	1.1774	1.1767
1.5	1.2583	1.2514	1.2475	1.2461	1.2454
2.5	1.3257	1.3183	1.3142	1.3128	1.3121
5.0	1.4280	1.4201	1.4160	1.4146	1.4139
12.5	1.5073	1.4992	1.4951	1.4938	1.4931
62.5	1.5474	1.5230	1.5113	1.5075	1.5056
90	1.5982	1.5428	1.5207	1.5127	-
CPU(s)	-	-	267.4	910.2	2491.0

Another observed result was the numerical difficulty in satisfying the zero transversal velocity at the wall and at the centerline of the duct, simultaneously. This has certainly influenced the longitudinal velocity component convergence and the local mass balance.

Table 6 - Streamfunction formulation: Longitudinal velocity convergence in center of the duct. Adaptive procedure eficiency with a 10^{-5} tolerance. CPU time in the microcomputer.

X^+	N=10	N=20	N=40	N=60	ADAPT.
0.0625	1.0252	1.0436	1.0494	1.0509	1.0509
0.125	1.0512	1.0661	1.0712	1.0724	1.0724
0.375	1.1111	1.1201	1.1235	1.1243	1.1243
0.75	1.1636	1.1707	1.1733	1.1738	1.1738
1.5	1.2351	1.2404	1.2423	1.2427	1.2427
2.5	1.3038	1.3078	1.3092	1.3095	1.3095
5.0	1.4089	1.4108	1.4115	1.4116	1.4116
12.5	1.4907	1.4909	1.4910	1.4910	1.4910
62.5	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000	1.5000
CPU(s)	-	-	-	19890	3932

The longitudinal velocity component convergence in the duct centerline, obtained from the streamfunction formulation solution, is presented in table 6. It should be noticed that, in this formulation, the velocity has a much faster convergence than in the primitive variables formulation.

The CPU time reduction allowed for microcomputer calculations. To avoid calculations with a unnecessarily high truncation order in the developing flow region, an adaptive procedure was employed, as described above, with a relative error target of 10^{-5}. This has reduced the CPU time from 5h 30 min to 1 h 15 min in the microcomputer, as is shown in table 6, providing a substantial gain in terms of processing time.

A comparison among the four solution strategies studied in the present work and the finite differences results is illustrated in figure 3, and the numerical values are found in table 7. In figure 3, it is worth noting the discrepancy in the fully developed flow results. This is due to the fact that the ordinary differential system is excessively stiff in the primitive variables case for positions far from channel entrance, when the adaptive procedure was not used, which might have attenuated this behavior if employed.

Table 7 shows the results obtained for the GITT solutions and the numerical results from Bodoia (1959), after Shah and London (1978). The three first ways of solution, in the primitive variables formulation, have convergence guaranteed for three digits, while the streamfunction solution converges with four digits (maximum error of 0.01%) and the finite differences solution has a mean error of 0.2%.It must be underlined that the streamfunction results were obtained in a microcomputer, that is

more than a hundred times slower than the CRAY Y-MP, used for the primitive variables solution.

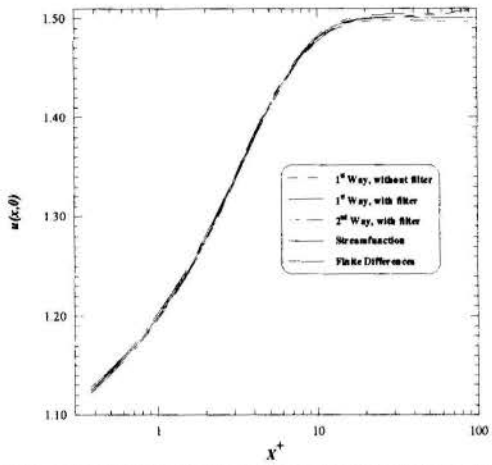


Figure 3 - Centerline longitudinal component velocity development. Comparison between the different solution strategies of the boundary layer equations.

Table 7 – Centerline longitudinal velocity component development. Comparison between the different solution strategies of the boundary layer equations.

	1st WAY w/out filter	1st WAY with filter	2nd WAY with filter	Stream function	FINITE DIFF.
X^+	$N = 80$	$N = 80$	$N = 80$	$N = 60$	-
0.375	1.1221	1.1221	1.1273	1.1243	1.1244
0.75	1.1715	1.1715	1.1767	1.1738	1.1767
1.5	1.2403	1.2402	1.2454	1.2427	1.2463
2.5	1.3072	1.3069	1.3121	1.3095	1.3121
5.0	1.4092	1.4087	1.4139	1.4116	1.4111
12.5	1.4891	1.4878	1.4931	1.4910	1.4903
62.5	1.5041	1.4967	1.5056	1.5000	1.4999
90	1.5075	1.4966	-	-	1.5000

CONCLUSION

A comparative study between the GITT strategies for laminar developing flow between parallel plates, in terms of the primitive variables formulation, showed that this formulation produces good results, though of very slow convergence, making it an inadequate choice for the production of benchmark results, overall in what concerns the global continuity satisfaction for this first way of calculation of the pressure gradient used by Machado (1992) and Carvalho et al. (1993). The second way of calculation of the pressure gradient allowed for the satisfaction of the global continuity; yet rates of convergence were not significantly altered.

The forced convection results suggest that the best boundary layer problem formulation, in order to optimize the GITT solution, is the streamfunction-only formulation. However, the solution of the equations, formulated in terms of primitive variables cannot be dismissed, as a deeper numerical analysis of the reasons that slow the convergence of this solution may clear up important informations for the progress of this technique.

The relatively high computational cost for the benchmark solutions is justified for the required high accuracy. However, the adaptive scheme was shown to be quite effective in the reduction of this cost. For lower precisions, the cost is even smaller. A more detailed analysis of the computational cost reduction is out of the scope of the present work.

REFERENCES

Bodoia, J.R. - *The Finite Difference Analysis of Confined Viscous Flows*, Ph.D. Thesis, Carnegie Institute of Technology, Pittsburg, Pennsylvania (1959).

Bodoia, J.R. and Osterle, J.F. - Finite Difference Analysis of Plane Poiseulle and Couette Flow Developments, *Appl. Sci. Res., sect. A*, vol. 10, 265-276 (1961).

Carvalho, T.M.B., Cotta, R.M. and Mikhailov, M.D. - Flow Development in The Entrance Region of Ducts., *Comm. Num. Meth. Eng.*, vol. 9, 503-509 (1993).

Cotta, R.M. - *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*, CRC Press, Boca Raton, FL, EUA (1993).

Cotta, R. M. - Benchmark Results in Computational Heat and Fluid Flow: - The Integral Transform Method, *Int. J. Heat Mass Transfer* (Invited Paper), vol. 37, suppl. 1, 381-394 (1994a).

Cotta, R.M. - The Integral Transform Method in Computational Heat and Fluid Flow, Special Keynote Lecture, *Proc. of the 10th Int. Heat Transfer Conf.*, Brighton, UK, vol. 1, SK-3, 43-60, August (1994b).

Cotta, R.M. and Carvalho, T.M.B. - Hybrid Analysis of Boundary Layer Equations for Internal Flow Problems, *Proc. of the 7th. Int. Conf. on Num. Meth. in Laminar & Turbulent Flow*, Part 1, 106-115, Stanford, CA, July (1991).

Figueira da Silva, E. - *Integral Transformation of the Boundary Layer Equations for Internal Convection in the Streamfunction and Primitive Variables Formulations*, M.Sc. Thesis (in portuguese), Mechanical Engineering Dept., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil (1994).

Figueira da Silva, E., Pérez Guerrero, J. S. and Cotta, R.M. - Integral Transform Solution of Boundary Layer Equations in Streamfunction-Only Formulation, *Appl. Math. Modelling*, submitted (1996).

IMSL Library - Math/Lib, Houston, Texas (1989).

Machado, H.A. - *Hybrid Numerical-Analytical Solution of the Boundary Layer Equations for Internal Convection*, M.Sc. Thesis (in portuguese), Mechanical Engineering Dept., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil (1992).

Machado, H.A. and Cotta, R.M. - Integral Transform Method for Boundary Layer Equations in Simultaneous Heat and Fluid Flow Problems. *Int. J. Num. Meth. Heat & Fluid Flow*, vol. 5, p. 225-237 (1995).

Pérez Guerrero, J.S. and Cotta, R.M. - Integral Transform Solution of Developing Laminar Duct Flow in Navier-Stokes Formulation, *Int. J. Num. Meth. in Fluids*, vol. 20, 1203-1213 (1995).

Plotkin, A. - Spectral Method Solutions for Some Laminar Channel Flows with Separation, *AIAA J.*, vol. 20, n. 12, 1713-1719 (1982).

Schlichting, H. - *Boundary-Layer Theory*, McGraw-Hill, 7th ed., New York, (1979).

Shah, R.K. and London, A.L. - Laminar Flow Forced Convection in Ducts, *Adv. Heat Transfer, Suppl. 1*, Academic Press, New York (1978).

ABCM

NONSTATIONARY ITERATIVE METHODS APPLIED TO POSITIVE DEFINITE ALGEBRAIC LINEAR SYSTEMS

Newton R. Santos
Departamento de Pesquisa e Pós-Graduação
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais
30510-000, B. Horizonte, MG, BRASIL.

SUMMARY

A new semi-iterative method (RFII-SI method) is developed related to the Richardson's second degree iterative method (RFII method). Both methods are applied to the class of positive definite algebraic linear systems, which includes the Ortega problem and the stochastic problem. Computational results of these methods and those of the nonstationary Richardson first degree method (NSR) are shown for comparison. The analysis is applicable to every positive definite linear problem which matrix possesses two clusters of eigenvalues.

INTRODUCTION

One of the efficient techniques for the resolution of algebraic linear systems employs the Chebyshev extrapolation. Such procedure applied to the Richardson second degree method leads to the semi-iterative method RFII-SI (Santos and Evans, 1994).

Both methods build up sequencies of approximations to the problem solution, through a three term recurrent algorithm. The convergence is guaranteed if the system matrix is positive definite, with condition number not large, which includes several applications, such as the solving equation resulting from the application of the finite element method to boundary value problems.

Currently, there has been the search to solve, advantageously, the above resulting algebraic system through the nonstationary iterative methods. Therefore, the Chebyshev semi-iteration procedure is pertinent, whenever this technique is applicable, which usually leads to more efficient algorithms. The efficient semi-iteration technique requires that the eigenvalues of the basic method iteration matrix, upon which the procedure is built up, has got real eigenvalues. This occurs with, for example, the matrix associated to the Ortega problem. This work is also concerned with the nonstationary first degree Richardson method for which it is possible to establish optimal parameters in especial cases leading to a very fast algorithm (Evans and Santos, 1993). In our experiments we have dealt with stochastic and Ortega problens whose matrix has two clusters of eigenvalues, by treating it through the three above mentioned methods, in order to analyse their performance through practical and theoretical points of view.

CLASSES OF PROBLEMS

Consider the algebraic linear system

$$A x = b \tag{1}$$

where A is a given nonsingular matrix of order N, b is a given vector of N components and x is an unkown N-component vector.

Now consider the class of (1) given by

$$A = C R C^{-1} \tag{2}$$

where R is any given matrix with known spectrum and C a unsymmetric matrix verifying

$$C = I + uv^T \tag{3}$$

such that

$$u = [1 \ \dots \ 1]^T \tag{4}$$

and

$$v = [1 \ \dots \ 1, -1 \ \dots \ -1]^T \tag{5}$$

for n even, in which half of the components are 1 and the other half -1.

The inverse matrix C^{-1} is calculated by

$$C^{-1} = I - uv^T \tag{6}$$

The class of matrix A, similar to R, thus obtained is called "Ortega" and the problem (1) which presents this kind of matrix is named "Ortega's problem".One matrix of this class, generated this way, will be unsymmetric. It is also possible to obtain symmetric matrices through the employment of a convenient vector **v** in eq. (5).

Another class of problems (1) of interest is that which matrix entries are given by

$$A_{ij} = 1, \quad i = j \tag{7}$$

$$A_{ij} = q, \quad \text{otherwise} \tag{8}$$

where q is a known constant.

The latter class of problems is named Stochastic. It arises from stochastic process with application in Statistics (Varga,1962). For engineering applications, see also (Segerlind, 1976; p:216).

Furthermore, another important fact is related to its spectrum which may be analiticaly determined in terms of the constant q.

The importance of the Ortega problem is due to the property that its spectrum may be pre-definible, which is adequate to the application of semi-iterative methods, since, in one hand, it demands the knowledge of the eigenvalue bounds for the iteration matrix associated to the problem (1), and on the other hand, offers a faster convergence. The results concerning the analysis of its convergence are extendable to problems whose eigenvalues possess the same behaviour. Ill-conditioned positive definite problems are one example, since they should be treated by preconditioned techniques before applying any specific resolution method. These techniques generally lead to a two cluster spectrum problem, whose matrix may be efficiently simulated by the Ortega's one; see (Campos, filho and Rollett, 1992) .

THE RFII AND RFII-SI METHODS

The RFII method, applied to problem (1), generates a sequence of approximations, viz. $\{x^{(n)}\}$, for the solution given by

$$x^{(n+1)} = (1-w)\, x^{(n-1)} + [(w-p)I + pF]\, x^{(n)} + ph\,, \quad n = 1, 2, \ldots \tag{9}$$

where

$$F = I - rA \tag{10}$$

$$h = rb \tag{11}$$

and the non-null parameters r, w, and p are to be determined.

Let the eigenvalues λ of the matrix F satisfy

$$a \le \lambda \le b < 1\,,\ b > a \tag{12}$$

Since the eigenvalues of A are positive, then by a suitable choice of the parameter r, the condition (12) will be fulfilled.

The determination of the parameters r,w, and p is carried out with the scope that the spectral radius $\rho(\hat{R})$ of the 2N order matrix

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ (1-w)I & (w-p)I + pF \end{bmatrix} \tag{13}$$

be a minimum. If condition (12) is prescribed, this requires the calculations

$$s = \frac{b-a}{2-(a+b)} \tag{14}$$

$$w = \frac{2}{1+\sqrt{1-s^2}} \tag{15}$$

$$p = \frac{2w}{2-(a+b)} \tag{16}$$

Two initial vectors are necessary to start the alorithm (9). The vectors, for exemple, $x^{(0)} = 0$ (null vetor) e $x^{(1)} = b$ are sometimes used.

The convergence of this method is guaranteed when applied to problems with positive definite matrix, which includes the problems of interest already mentioned.

It is observed that (9) can be re-written, in the compact form

$$u^{(n+1)} = \hat{R}u^{(n)} + \hat{h} \tag{17}$$

recalling that $\hat{R}$ is given by (13), $\hat{h}$ the 2N-component vector

$$\hat{h} = \begin{bmatrix} 0 & ph \end{bmatrix}^T \tag{18}$$

and $u^{(n+1)}$, the following vector given by 2N components

$$u^{(n+1)} = \begin{bmatrix} x^{(n)} & x^{(n+1)} \end{bmatrix}^T \tag{19}$$

The convergence is a consequence of the fact that the spectral radius satisfies $\rho(\hat{R}) = (\omega - 1)^{1/2}$, since $1 < w < 2$, as A is a positive definite matrix and also by taking $r < 0$.

Now, let us consider the new notations

$$y_1^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} \alpha_{nk} x^{(k)} \tag{20}$$

$$y_2^{(n)} = \sum_{k=0}^{n} \alpha_{nk} x^{(k+1)} \tag{21}$$

with the constraint $\sum_{k=0}^{n} \alpha_{nk} = 1$. Define also

$$v^{(n)} = \begin{bmatrix} y_1^{(n)} & y_2^{(n)} \end{bmatrix}^T \tag{22}$$

By applying the Chebyshev's extraplolation technique to the formulae (20) and (21), and by determining the optimal parameters α_{nk}, one arrives to the semi-iterative method given by the recurrence formula

$$v^{(n+1)} = \frac{r_{n+1}}{2-(c+d)}\left\{\left[2\hat{R} - (c+d)I\right]v^{(n)} + 2h\right\} + \left(1 - r_{n+1}\right)v^{(n-1)}, \quad n \ge 0 \tag{23}$$

where the parameters r_n are given by

$$r_1 = 1,\ r_2 = \frac{2z^2}{2z^2 - 1},\ r_{n+1} = \left(1 - \frac{r_n}{4z^2}\right)^{-1} \tag{24}$$

and z, a parameter calculated in terms of the eigenvalue bounds c and d of $\hat{R}$, is

$$z = \frac{2-(c+d)}{d-c} \tag{25}$$

The convergence of this new method, in the cases in study, comes from the fact that the constants c and d are given by

$$d = -c = \frac{w\,s}{2} \tag{26}$$

Substitution for these values of c and d in the matrix

$$M = \frac{2\hat{R}-(c+d)I}{2-(c+d)} \tag{27}$$

implies that $M = \hat{R}$

Thus, $\rho(M) = \rho(\hat{R}) < 1$

Now, for z large enough, it suffices to apply the Theorem 4.1, (Santos and Linhares, 1986), to conclude that the convergence is guaranteed.

THE NSR METHOD

The known first degree nonstationary Richardson (Method) will be denoted as

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k\,(b - A\,x^{(k)}) \qquad k = 0,1,\ldots \tag{28}$$

The error with respect to the k-th iteration, for this method, is given by

$$\varepsilon^{(k)} = P_k(A)\,\varepsilon^{(0)} \tag{29}$$

where

$$P_k(x) = \prod_{i=1}^{k-1} (1 - \alpha_i\, x) \tag{30}$$

is a polynomial in x with the property $P_k(0) = 1$. The numbers $\frac{1}{\alpha_i}$ are the zeros of the polynomial, i. e., $P_k(\frac{1}{\alpha_i}) = 0$, and can cause round off difficulties.

It is desired that the error $\varepsilon^{(k)}$ should be made as small as possible, hence that $P_k(A)$ should also be as small as possible.

The obvious choice is $\alpha_i = \lambda_i^{-1}$, where λ_i are the eigenvalues of A. Generally, it is not possible to have this choice, since we have no predetermined knowledge of the eigenvalues So, an alternative procedure of making $P_k(x)$ small over the interval [a,b] is adopted by the use of Chebyshev polynomial acceleration to achieve a min-max solution, viz., the solution obtained through the minimization of the average spectral radius associated to the method, i.e., the determination of the parameters should be done by setting

$$\rho_k\,[P_k(A)] = [\max |P_k(\lambda)|]^{1/k} \tag{31}$$

is a minimum over all eigenvalues λ of A

However, for some special matrices we have a specific knowledge of the eigenvalues and hence an alternative procedure can be considered.

COMPUTATIONAL RESULTS

Computational experiments related to the discussed methods are shown in the following Tables 1 up to 8. They show the iteration counts for each method, different sizes and condition number P of problems, taking into account a tolerance of 10^{-5}, as a stopping criterion. The Tables 1 and 2 contain the computational experiments with respect to the stochastic problem while the results that are presented for the Ortega problem are contained in Tables 3 to 8.

The variety of the presented numerical data refers to different situations for each class of problems. Bearing in mind that the results may vary by changing the condition number and by using approximate instead of exact parameters, it became obvious that several tests were necessary.

Table 1: Stochastic problem - exact parameters, condition number P = N.

Order of Matrix: N	Iteration Counts		
	RFII Method	RFII-SI Method	NSR Method
50	43	22	3
100	61	26	3
200	83	31	3
500	127	39	3

Table 2: Stochastic problem - approximate parameters, condition number P = N, n.c. means *no convergence*..

	Iteration Counts					
Appr.	2%			5%		
Meth. / N=P	RFII	RFII SI	NSR	RFII	RFII SI	NSR
50	50	28	> 50	53	31	n.c.
100	69	56	n.c.	73	221	n.c.
200	94	175	n.c.	100	n.c.	n.c.
500	143	>200	n.c.	151	n.c.	n.c.

The condition number P for the stochastic problem grows with N since it is equal to the matrix order N. Therefore, for this kind of problem the analysis is restricted to the two following cases: exact parameters (Table 1) and approximate parameters (Table 2); the approximation error being 2% and 5% for both parameters.

For the Ortega's problem, on the other hand, it was possible to select the condition number P (Tables 3 to 8) and approximate parameters so that to present an approximation error of 1% (Tables 6 and 7), 2% and 5% (Table 8).

The computational results that follow refer to an Ortega matrix A, in Eq. (1), presenting ten distinct eigenvalues distributed in two clusters concentrated around 1 and the condition number P. Two clusters, used as input data for example, are given, respectively, by the following sets:
{1,2,3,4,5,46,47,48,49,50}; {1,2,3,4,5,496,497,498,499,500}.

The first data set was used in Tables containing results with respect to P=50, and the second one in Tables related to P=500.

Corresponding to them, it was established, respectively, the two following data set for defining their multiplicities:
{20,2,1,1,1,1,1,1,2,20} and {245,2,1,1,1,1,1,1,2,245} in which the order multiplicities are in correspondence to the eigenvalue position in the data set.

Table 3: Ortega problem - exact parameters, condition number P = 50.

Order of Matrix: N	Iteration Counts		
	RFII Method	RFII-SI Method	NSR Method
100	52	25	19
200	50	26	20
300	52	27	30
400	53	29	40
500	70	32	45

Table 4: Ortega problem - exact parameters, condition number P = 100.

Order of Matrix: N	Iteration Counts		
	RFII Method	RFII-SI Method	NSR Method
100	74	31	20
200	74	33	30
300	76	32	74
400	78	34	82
500	81	37	92

Table 5: Ortega problem - exact parameters, N=400, condition number P varies.

Method / p	Iteration Counts		
	RFII Method	RFII-SI Method	NSR Method
200	102	39	50
500	160	60	160
1000	260	63	289
5000	539	170	>600

Table 6: Ortega problem - approximate parameters (both parameters 1% error), condition number P = 50.

Order of Matrix: N	Iteration Counts		
	RFII Method	RFII-SI Method	NSR Method
100	49	40	50
200	50	40	50
300	50	41	50
400	53	43	53
500	55	45	56

Table 7: Ortega problem - approximate parameters, (1% error), condition number P = 100.

Order of Matrix: N	Iteration Counts		
	RFII Method	RFII-SI Method	NSR Method
100	68	61	30
200	94	61	60
300	102	61	77
400	127	62	91
500	141	64	110

Table 8: Ortega problem - approximate parameters. N=400, parameter errors and condition number P vary.

Appr.	Iteration Counts					
	2%			5%		
Meth. / P	RFII	RFII SI	NSR	RFII	RFII SI	NSR
50	57	49	30	62	141	n.c.
200	97	>300	n.c.	102	n.c.	n.c.
400	127	n.c.	n.c.	133	n.c.	n.c.
500	142	n.c.	n.c.	151	n.c.	n.c.

FINAL REMARKS AND CONCLUSIONS

By observing the computational results related to the stochastic problem, it is apparent that the nonstationary methods perform better if the parameters are exact (Table 1).

The NSR is very competitive in this case. However, if the parameters are inexact one should prefer the RFII method (Table 2).

In the case of the Ortega problem presenting exact parameters, we can conclude that the NSR method performs suitably well for problems not too large and with small condition number, i.e., the matrix order N is less than 300 in our experiments. When N increases the superiority of the RFII-SI is evident. Besides, it must be remarked that the NSR and RFII methods are sensitive to the condition number variation, since their performance become worse as P increases (Tables 3 to 5).

On the other hand, if small parameter errors do occur (eigenvalue error bounds), then although the RFII-SI method has performed less effectively than in the exact case, it is still better than the other methods (Tables 6 and 7), no matter the size of the problem. Finally, the Table 8 reveals that, for the case in which the parameter errors are greater than 2% and combined to larger condition number, the methods RFII-SI and NSR do not work. By consequence one should apply the RFII or other suitable methods in this case.

Nonetheless, this fact is not surprisingly as these methods are based upon optimum parameters. It would be predictable that the perturbation on the parameter values should not be large enough to annihilate its acceleration function which is their purpose. Our research has shown that if the condition number is not large, i.e., less than one hundred, then at most 1% error is admissible in order to make effective use of the nonstationary methods . Otherwise, precondition techniques should be required before using the nonstationary methods under analysis. Ill-conditioned problems are just one kind of problems for which these conclusions are pertinent.

ACKNOWLEDGMENT

The author wishes to thank CNPq and FAPEMIG for financial support (grants 30.0407/84-0 and CEX 282/95, respectively)

REFERENCES

Campos, filho and Rollett,1992."Study of convergence behavior of conjugate gradient-type methods for solving unsymmetric systems. Report no. 24/92, Oxford University Computing Laboratory, U.K.

Evans, D. J. and Santos, N. R., 1993, "Nonstationary iterative methods for stochastic systems", Comp. Stud. Rep. 831, Loughborough University of Technology, U.K.

Santos, N. R. and Evans, J. D., 1994, "Chebyshev semi-iterative solution of stochastic and Ortega problems based on second degree Richardson method", *Int. J. of Comp. Math.*, Vol. 53, pp. 45-59.

Santos, N.R. and França, G.A.C., 1991, "Solução eficiente da equação de elementos finitos para problemas parabólicos", Atas do *SIMMEC 91 - Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional*. Belo Horizonte- MG, pp. 390-3971.

Santos, N. R. & Linhares, O. L., 1986, "Convergence of Chebyshev semi-iterative methods", *Journal of Comp. and Appl. Math.*, Vol. 16, pp. 59-68.

Segerlind, L.J. 1976. " Applied Finite Element Analysis" , J. Wiley & Sons, Inc.

UM MÉTODO NÃO PARAMÉTRICO PARA A DETERMINAÇÃO APROXIMADA DE FUNÇÕES DE TRANSFERÊNCIA

Miriam D. X. Lazarini[1], Eduardo B. Medeiros[2], Marcley L. Pereira[3]
2-Departamento de Engenharia Mecânica - UFMG
3-Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-MG
1-Departamento de Engenharia Elétrica - CEFET-MG
30510-000 - Belo Horizonte - MG - Brasil

RESUMO

Apresenta-se um método não paramétrico para identificação de parâmetros. Este método pode ser usado na obtenção de funções de transferência aproximadas diretamente de resultados experimentais, mesmo quando as equações que descrevem os fenômenos não são conhecidas. O teste de pulso foi associado a técnicas clássicas de otimização numérica, obtendo-se uma boa ferramenta para tratar muitos sistemas de engenharia, como por exemplo, os que são comandados por válvulas de controle. O método foi implementado em um IBM-PC e "casado" a resultados experimentais. Os resultados obtidos indicam que o método é tanto confiável como útil em situações práticas reais.

INTRODUÇÃO

Embora os métodos de simulação computacional tenham se tornado em anos recentes altamente sofisticados, sua eficiência depende da confiabilidade e conhecimento adequado do processo físico (Franklin et. al. 1991). Os casos mais complexos requerem uma técnica específica de identificação de parâmetros no desenvolvimento da modelagem, para atingir uma simulação adequada. O objetivo é a obtenção de uma estratégia de análise que permita estabelecer uma coerência entre os dados obtidos através de medições e considerações sobre a teoria.

As técnicas de identificação de parâmetros, de modo semelhante ao que aconteceu em outras áreas, têm se desenvolvido em ritmo acelerado nas duas últimas décadas, como uma decorrência natural da maior disponibilidade de recursos computacionais. A escolha da técnica mais interessante varia para cada aplicação específica (Graebe, 1994), sendo função do comportamento físico do sistema, e da disponibilidade de obtenção de dados que permitam a utilização de uma técnica específica. A utilização de "testes de pulso" é já bem estabelecida (Law e Bailey, 1963), e naturalmente apresenta suas vantagens específicas. Quando associada a métodos de otimização formal, como os aqui estão descritos, resultados extremamente interessantes podem ser obtidos, para um grande número de processos em Engenharia (Iserman, 1993). Nesta categoria estão incluídos sistemas que atuam com válvulas de controle, normalmente de modelagem complexa, mas exigindo um controle adequado de abertura para poderem operar de forma adequada. Apesar de sua aplicabilidade bem ampla, este trabalho foi desenvolvido considerando-se sua potencial utilização "on line" nos sistemas de controle automático desta classe de sistemas. Este método começa a ser testado pelos autores em sistemas de controle de dinamômetros hidráulicos, com boas perspectivas, permitindo que se melhore consideravelmente os problemas (inerentes) de instabilidade associados a estes sistemas a um custo moderado.

DESCRIÇÃO DO MÉTODO

O teste de pulso para identificação de processos é um método que leva a um diagrama de resposta em frequência do processo em malha aberta. Neste método, um pulso de forma arbitrária ($f_e(t)$) é aplicado na entrada do processo durante sua operação em regime permanente e a resposta transiente é registrada.

A função de transferência é então avaliada pela Transformada de Fourier, Eq. (1).

$$G_{(j\omega)} = \frac{F[f_s(t)]}{F[f_e(t)]} \tag{1}$$

Então, temos, pela definição de Transformada de Fourier, a Eq.(2).

$$G(j\omega) = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} f_s(t)\cdot e^{(-j\omega t)}\cdot dt}{\int_{-\infty}^{+\infty} f_e(t)\cdot e^{(-j\omega t)}\cdot dt} \tag{2}$$

Uma representação qualitativa típica de $f_e(t)$ e $f_s(t)$ é mostrada na figura (1).

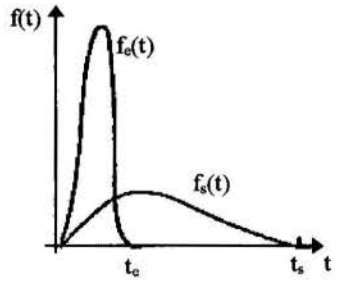


Figura 1 - Representação qualitativa de $f_e(t)$ e $f_s(t)$

Os valores de $f_s(t)$ e $f_e(t)$ são zero para o tempo menor que zero, logo, o limite inferior de integração pode ser alterado para zero nas integrais da Eq. (2). Pode-se notar, também, que o tempo final do sinal de entrada é t_e e o do sinal de saída é t_s.

Desde que para tempos maiores que os respectivos tempos terminais os sinais voltam a ser zero, os limites superiores das integrais da Eq. (2) podem ser reduzidos a t_e e t_s (indicados na figura 1) no denominador e no numerador respectivamente, resultando na Eq.(3).

$$G_{(j\omega)} = \frac{\int_0^{t_s} f_s(t) \times e^{-j\omega t} dt}{\int_0^{t_e} f_e(t) \times e^{-j\omega t} dt} \tag{3}$$

que, a partir de relações clássicas pode ser escrita na forma da Eq. (4).

$$G_{(j\omega)} = \frac{\int_0^{t_s} f_s(t) \times \cos(\omega t) dt - j\int_0^{t_s} f_s(t) \times \text{sen}(\omega t) dt}{\int_0^{t_e} f_e(t) \times \cos(\omega t) dt - j\int_0^{t_e} f_e(t) \times \text{sen}(\omega t) dt} \tag{4}$$

Utilizando-se as letras A e B para se escrever a Eq. (4) simplificadamente, obtem-se a Eq. (5).

$$G_{(j\omega)} = \frac{A_s - jB_s}{A_e - jB_e} \tag{5}$$

Para o diagrama de Bode, a razão de amplitudes é dada pela magnitude de $G(j\omega)$ (designado por magG), dada pela Eq. (6).

$$\text{magG} = \left[\frac{A_s^2 + B_s^2}{A_e^2 + B_e^2}\right]^{0,5} \tag{6}$$

Na aplicação típica, um valor específico de frequência ω é escolhido. As integrais são calculadas numericamente, fornecendo um único valor de A_e, B_e, A_s e B_s. Substituindo estes valores na Eq. (6), tem-se um valor de magnitude correspondente ao valor de frequência escolhido. O procedimento é repetido para vários valores de ω, e os vários valores das magnitudes são calculados.

Neste ponto o programa fornece os valores da magnitude para os vários valores de frequência arbitrados. A etapa seguinte consiste na aproximação destes valores por uma função de transferência de ordem 1 ou 2, como se descreve a seguir.

A minimização da função somatório dos erros quadráticos (mínimos quadrados) fornece os valores da constante de tempo (τ) para sistemas de primeira ordem e, do coeficiente de amortecimento (ξ) e da frequência natural não amortecida (ω_n) para sistemas de segunda ordem. A função erro é dada pela Eq. (7) (Ljung, 1976):

$$F_{erro} = \sum_{k=1}^{n} \left[\text{MagG}_{(k)} - \text{Fi}_{(B,k)}\right]^2 \tag{7}$$

onde:
$\text{MagG}_{(k)} \Rightarrow$ valor da magnitude no ponto k (frequência);

Para sistemas de primeira ordem, cuja função de transferência é dada pela Eq. (8):

$$FT = \frac{1}{\tau\omega j + 1} \tag{8}$$

o valor de Fi é dado pela Eq. (9):

$$\text{Fi} = \left(\tau^2\omega^2 + 1\right)^{-1/2} \tag{9}$$

Para sistemas de segunda ordem, cuja função de transferência é dada pela Eq. (10):

$$FT = \frac{1}{1 + 2\xi\frac{\omega}{\omega_n} j - \frac{\omega^2}{\omega_n^2}} \tag{10}$$

O valor de Fi é dado pela Eq. (11):

$$\text{Fi} = \left[\left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_n^2}\right)^2 + \left(2\xi\frac{\omega}{\omega_n}\right)^2\right]^{-1/2} \tag{11}$$

Para o algoritmo de otimização é conveniente se efetuar uma busca na forma da Eq. (12).

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)} \tag{12}$$

onde, os termos são:
$B^{(k)}$: k-ésima tentativa de solução;
$d^{(k)}$: direção de busca na k-ésima iteração;
$\alpha^{(k)}$: define o "tamanho do passo".

B pode assumir as seguintes variáveis:
- τ^2 para sistemas de primeira ordem;
- ξ e ω_n para sistemas de segunda ordem

Iteração Típica:
Fase 1: Determinação de um intervalo que contém α^* (α^*= valor ótimo);
Fase 2: Redução do intervalo que contém α^* até um valor apropriado;
Fase 3: Interpolação sobre o intervalo final.

<u>Fase 1- Método da busca unidirecional - Determinação do intervalo que contém α^*</u>. A partir de $\alpha = \alpha_1$, estabelece-se uma progressão geométrica do tipo, Eq. (13):

$$\alpha_{i+1} = \alpha_i + \Delta_i \tag{13}$$

onde: $\Delta_{i+1} = k\Delta_i$.

Com os falores de α_i calcula-se as $f(\alpha_i)$ até que $f(\alpha_{i+1}) \geq f(\alpha_i)$ $\Rightarrow$ situação na qual sabemos que $\alpha^* > \alpha_i$.

Com o valor de α_1, obtem-se o valor de α_2 ($\alpha_2 = \alpha_1 + \Delta_i$) e os valores de $f(\alpha_1)$ e $f(\alpha_2)$.

a) Se $f(\alpha_2) < f(\alpha_1)$:
O mínimo está a direita e aí então calcula-se α_3, α_4 e assim por diante até que $f(\alpha_{i+1}) > f(\alpha_i)$. Supondo-se que $f(\alpha_4) > f(\alpha_3)$;

nesta situação, passou-se pelo mínimo e tem-se o intervalo que contém α^*: o valor de α^* estará entre α_2 e α_4.

b) Se $f(\alpha_2) > f(\alpha_1)$:
O mínimo está a esquerda e aí então recalcula-se α_2 como $\alpha_2 = \alpha_1 - \Delta_i$ e repete-se o procedimento do item (a), porém, com o sinal negativo acompanhando o Δ.

Se ao efetuar-se a busca para a esquerda e $f(\alpha_2) > f(\alpha_1)$, o valor inicial arbitrado de α está próximo do mínimo.
Neste caso, faz-se:

$\alpha_1 = \alpha_2$; $f(\alpha_1) = f(\alpha_2)$;

$\alpha_2 = \alpha_1$; $f(\alpha_2) = f(\alpha_1)$;

neste instante, tem-se $f(\alpha_2) < f(\alpha_1)$ e chega-se na situação do item (a). Neste caso, calcula-se α_3 ($\alpha_3 = \alpha_2 + \Delta_2$) e $f(\alpha_3)$ e, confirma-se que $f(\alpha_3) > f(\alpha_2)$; logo, tem-se o intervalo entre α_1 e α_3 que contém α^*.

Fase 2 - Método da Seção Áurea - Redução do intervalo que contém α^*. Utiliza-se o Método Seção Áurea (Golden Section) onde se determina o mínimo de uma função f, onde f é função da variável independente α.

Considera-se que o intervalo que contém $\alpha_{ótimo}$ é conhecido (determinado na fase 1) e denomina-se como α_i e α_s os valores dos limites inferior e superior respectivamente. Conhece-se também os valores de $f(\alpha_i)$ e $f(\alpha_s)$.

Agora, utilizar-se-á dois pontos intermediários entre α_i e α_s: α_1 e α_2, sendo $\alpha_1 < \alpha_2$ e calcula-se os valores da função nestes pontos ($f(\alpha_1)$ e $f(\alpha_2)$). Compara-se $f(\alpha_1)$ com $f(\alpha_2)$:
a) Se $f(\alpha_1) > f(\alpha_2) \Rightarrow$ o mínimo está à direita de α_1; logo, tem-se um novo limite inferior que é α_1.
b) Se $f(\alpha_1) < f(\alpha_2) \Rightarrow$ o mínimo está à esquerda de α_2; logo, tem-se um novo limite superior que é α_2.

Com o novo limite determinado, calcula-se o novo ponto intermediário e assim por diante até que o critério de convergência seja satisfeito (por exemplo, $\alpha_s - \alpha_i \leq \varepsilon$).

O ideal é utilizar um método para escolher os pontos intermediários de forma a reduzir os limites o mais rápido possível. O algoritmo mais eficiente é o que reduz os limites pela mesma fração em cada iteração. Nesca caso, pode-se economizar tempo computacioanal, pois três dos quatro valores da iteração atual são aproveitados da iteração anterior.

Utilizando-se a proporção áurea

$$Z = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$$

tem-se que, os pontos intermediários podem ser calculados segundo as Eq. (14) e Eq. (15).

$$\alpha_1 = \alpha_i + Z\,(\alpha_s - \alpha_i) \tag{14}$$

$$\alpha_2 = \alpha_s - Z\,(\alpha_s - \alpha_i) \tag{15}$$

Algoritmo da Seção Áurea:

Dados α_i, $f(\alpha_i)$, α_s e $f(\alpha_s)$;

$\alpha_1 = \alpha_i + Z\,(\alpha_s - \alpha_i)$;

$\alpha_2 = \alpha_s - Z\,(\alpha_s - \alpha_i)$;

$F_1 = f(\alpha_1)$;

$F_2 = f(\alpha_2)$;

Se $F_1 > F_2$	Se $F_2 > F_1$
$\alpha_i \leftarrow \alpha_1$	$\alpha_s \leftarrow \alpha_2$
$F_i \leftarrow F_1$	$F_s \leftarrow F_2$
$\alpha_1 \leftarrow \alpha_2$	$\alpha_2 \leftarrow \alpha_1$
$F_1 \leftarrow F_2$	$F_2 \leftarrow F_1$
$\alpha_2 = \alpha_s - Z\,(\alpha_s - \alpha_i)$	$\alpha_1 = \alpha_i + Z\,(\alpha_s - \alpha_i)$
$F_2 \leftarrow f(\alpha_2)$	$F_1 \leftarrow f(\alpha_1)$

Fase 3 - Algoritmo do Gradiente - Interpolação sobre o intervalo final. Efetua a busca através da Eq. (16).

$$B^{(i+1)} = B^{(i)} + \alpha^{(i)} d^{(i)} \tag{16}$$

Como busca-se o mínimo, deve-se ir em direção de menos o gradiente, descrito na Eq. (17).

$$d^{(i)} = -\nabla F^{(i)} \tag{17}$$

Os passos são dados até que o gradiente da função seja nulo; neste ponto, encontra-se o mínimo.

Critério de Convergência. De acordo com as condições necessárias para se encontrar o mínimo de uma função, um dos critérios de convergência é que o gradiente da função no ponto de mínimo seja nulo: $\nabla f(\alpha^*) = 0$, ou, no caso particular do software, $\nabla f(\alpha^*) \leq 1\times10^{-4}$. Também, utiliza-se como critério de convergência o fato de que quando se esta próximo ao mínimo, o valor de B na iteração atual é muito próximo do valor de B na iteração anterior ($B^{(i-1)}$); logo, $B^{(i)} - B^{(i-1)} \leq 1\times10^{-4}$ (no caso do software).

Neste ponto, o programa fornece o valor da constante de tempo (τ) para funções de transferência de primeira ordem, do coeficiente de amortecimento (ξ) e da frequência natural não amortecida (ω_n) para funções de transferência de segunda ordem.

Escolha da melhor função de transferência. O conhecimento inicial da natureza do sistema e/ou a observação das curvas de resposta dinâmica do sistema fazendo as aproximações para primeira e segunda ordem permitem estimar a ordem mais indicada do sistema (Franklin et al. 1991).

A função de transferência final obtida para aproximações de primeira e segunda ordem é dada pelas Eq. (18) e Eq. (19).

$$FT = \frac{k \cdot e^{-(t_d s)}}{\tau \cdot s + 1} \text{ (primeira ordem)} \tag{18}$$

$$FT = \frac{\omega_n^{\,2} \cdot k \cdot e^{-(t_d s)}}{s^2 + 2 \cdot \xi \cdot \omega_n + \omega_n^{\,2}} \text{ (segunda ordem)} \tag{19}$$

onde:
k: ganho do sistema;
t_d: tempo morto.

O valor de t_d é obtido verificando-se o tempo que se passou desde o instante no qual um pulso foi aplicado na entrada até o instante da primeira variação da saída devido a este pulso.

O valor de k é dado pelo valor da magnitude calculada para frequência zero.

O método descrito nas etapas anteriores foi implementado em um IBM-PC, obtendo-se bons resultados. Esta implementação permite inclusive um processamento imediato dos resultados no próprio equipamento utilizado para leitura de dados. A validação do método é descrita a seguir.

RESULTADOS OBTIDOS

Em uma primeira análise vários testes foram feitos para se validar o método utilizando-se circuitos elétricos. Circuitos elétricos são claramente interessantes para a validação de métodos de identificação: por se prestarem a simulação de um considerável número de sistemas, por permitirem ajuste exato dos parâmetros, por permitirem leitura direta sem maiores influências introduzidas por não linearidades de transdutores e dos componentes do sistema, possibilitando em suma, uma validação de boa qualidade. Para os testes foram utilizados circuitos elétricos de primeira ordem e de segunda ordem subamortecidos e sobreamortecidos, de acordo com a montagem da figura 2.

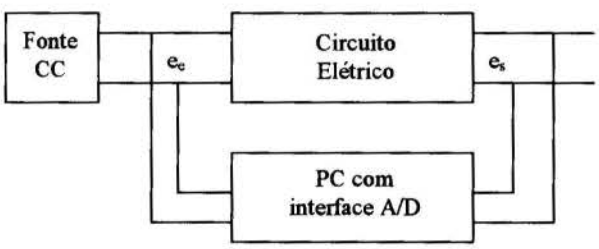


Figura 2 - Diagrama do sistema utilizado nas montagens

Para fins comparativos, as curvas de resposta dinâmica do sistema foram traçadas para os sistemas de primeira ordem e de segunda ordem subamortecidos e sobreamortecidos utilizando-se: a modelagem matemática com os valores dos parâmetros conhecidos, a modelagem com os valores dos parâmetros fornecidos pelo software e a resposta do teste prático. As figuras 3, 4 e 5 mostram estas curvas. Vale ressaltar que no caso das curvas traçadas a partir da modelagem matemática foi considerada a função de transferência sem a utilização do ganho e do tempo morto; caso estas constantes fossem utilizadas, os resultados poderiam ser ainda melhores.

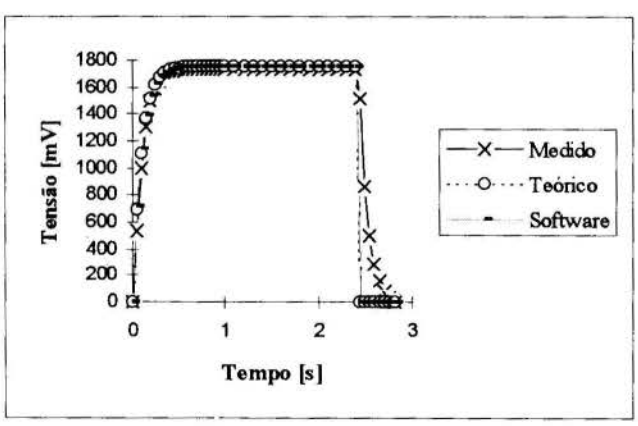


Figura 3 - Curvas de saída do sistema de primeira ordem

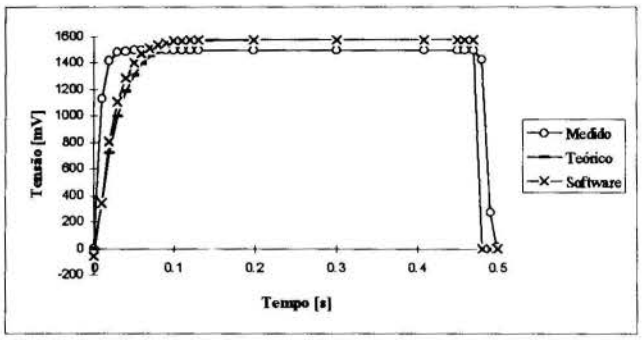


Figura 4 - Curvas de saída do sistema de segunda ordem sobreamortecido

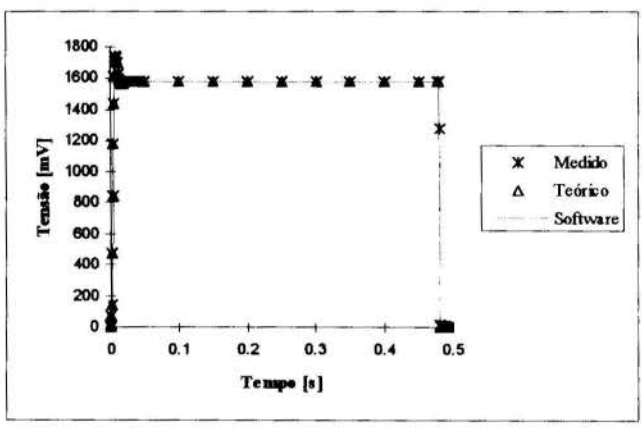


Figura 5 - Curvas de saída do sistema de segunda ordem subamortecido

A figura 6 destaca o transitório do sistema de segunda ordem subamortecido.

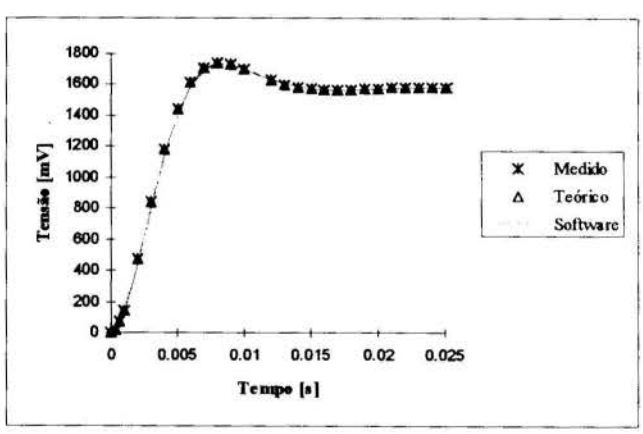


Figura 6 - Transitório das curvas de saída do sistema de segunda ordem subamortecido

Na sequência de exemplos aqui fornecidos, no teste feito para o sistema de primeira ordem com $\tau = 0{,}1$ obteve-se $\tau = 0{,}096$. Para o sistema de segunda ordem, caso sobreamortecido, com $\xi = 1{,}5$ e $\omega_n = 100$, obteve-se $\xi = 1{,}25$ e $\omega_n = 98{,}75$; para o caso subamortecido com $\xi = 0{,}589$ e $\omega_n = 471{,}41$, obteve-se $\xi = 0{,}592$ e $\omega_n = 459{,}59$.

CONCLUSÕES

O procedimento apresentado permite que se efetue a determinação de funções de transferência de primeira ou segunda ordem para uma ampla classe de sistemas, a partir de resultados experimentais, mesmo quando o modelo teórico do sistema não é conhecido.

A utilização do método de Mínimos Quadrados acoplado ao algoritmo do Gradiente, empregando neste problema técnicas que utilizam os métodos de busca unidirecional e da seção áurea, permite que os resultados das aproximações de funções sejam rapidamente obtidos com um erro pequeno. Isto implica em diminuição do tempo computacional e consequente melhoria geral, uma vez que em sistemas de controle o fator tempo pode ser crítico, particularmente em sistemas com atuação em tempo real.

O erro obtido nos testes feitos é, na maioria dos casos, inferior a 5%, o que é compatível com o que ocorre em sistemas industriais típicos.

Finalmente, cabe acrescentar que resultados preliminares obtidos pelos autores já indicam boa aplicabilidade do método para controle da válvula de carga de dinamômetros hidráulicos. Esta última técnica está em fase de implementação.

REFERÊNCIAS

Franklin, Gene F., Powell, J. David e Emani-Naeini, Abbas, "Feedback Control of Dynamic Systems", Addison-Wesley Publishing Company, second ediction, 1991.

Graebe, S. F., "Robust and Adaptative Control of an Unkown Plant: A Benchmark of New Format", Automatica, V. 30, pp. 567-575, 1994.

Iserman, R., "Practical Aspects of Process Identification", Automatica, V. 29, pp. 815-835, 1993.

Law, V. J., Bailey, R. V., "A Method for Determination of Approximate System Transfer Functions", Chemical Engineering Science, V. 18, pp. 189-202, Pergamon Press Ltd., 1963.

Ljung, Lennart, "Consistency of the Least-Squares Identification Method", IEEE, Technical notes and correspondence, pp. 779, 1976.

ABSTRACT

A non-parametric method for system identification is presented. This method can be used to obtain approximate transfer functions directly from experimental results, even if the governing equations are not knonw. A pulse test has been associeted with classical numerical optimization techniques in order to obtain a powerful tool to handle a variety of engineering installations, such as for example, those found in valve-controlled systems. The method has been implemented in an IBM-PC and software procedures have been matched with experimental measurements. These results indicate that the method is both reliable and useful in practical applications.

GENERAL INTEGRAL TRANSFORM SOLUTION OF TWO-DIMENSIONAL LAMINAR BOUNDARY LAYER EQUATIONS

Jian Su

Department of Mechanical and Material Engineering,
Instituto Militar de Engenharia, 22290-270, Rio de Janeiro, RJ, Brazil

ABSTRACT

We propose a generalized integral transform solution of the linearized boundary layer equations to describe the boundary layer velocity distortion caused by a distributed wall suction. When the disturbance to the basic Blasius flow is small, the flow can be described by linearized boundary layer equations. The partial differential equations are reduced to an infinite system of coupled ordinary differential equations by applying integral transformation in the transversal direction. A lowest order approximate solution, in analytic form, is obtained by neglecting all non-diagonal elements of the coefficient matrices. The approximate-analytic solution shows algebraic decay of the disturbance, which was confirmed by a complete hybrid numerical-analytical solution of the full truncated system. The convergence behavior of the solution is shown. The full nonlinear boundary layer equations can be recovered by adding the neglected quadratic terms to the linearized system. Numerical procedure for the nonlinear problem is indicated.

1. INTRODUCTION

The Generalized Integral Transform Technique has been developed in the last two decades to be an efficient and accurate mehtod for problems of diffusion and convection-diffusion in fluid flow and heat transfer. The essence of the method and its major applications are summarised in a recent book by Cotta(1993). A large class of nonlinear convection-diffusion problems, including boundary layer equations and full Navier-Stokes equations, have been successfully solved by using GITT.

Up to now, most of the applications are limited to internal flow and heat transfer problem, that is, without presence of an infinite boundary. Su(1993) has proposed an hybrid analytic-numerical scheme to solve unsteady boundary layer equations for flow over a semi-infinite flat plate, suject to time dependent boundary conditions. Lage and Rangel(1994) have solve the steady boundary layer equations in axisymmetric form for flow around a sphere. It appears that there is a large space for the application of GITT to more general external flow and heat transfer problems.

In this work, we are interested in a boundary layer developed over a semi-infinite flat plate subject to distributed wall suction. This problem is important in flow separation contral and in analysis of hydrodynamic stability of boundary layer with suction. Gaster(1995) has proposed a linearized Navier Stokes equation method for this problem. Linnick(1995) has carried experimental study for a related problem. There are strong interested to develope different methods, especially hybrid analytic-numerical solution, to get solution with higher efficiency and accuracy.

We proposed to solve the boundary layer equations by using the Generalized Integral Transform Techinque. In the next section, the perturbation equations are derived in transformed variables where the the mean flow is the Blasius similarity solution and the boundary layer thickness is a constant in transformed variables. In section 3, we introduce the eigenproblem suitable to our problem and derived the ordinary differential equations. A lowest-order approximate analytic solution is obtained by decoupling the system in section 4. In section 5 we describe the numerical procedure to solve the fully coupled system. Then we show the qualitative behavior of the approximate solution and a comparison with full coupled numerical solution. The convergence behavior of the coupled solution is shown. We also indicated how to recover the neglect nonlinear terms. Numerical solution of the full nonlinear system and comparison with other solutions are ongoing.

2. THE GOVERNING EQUATIONS

Let U_∞ be the freestream velocity and L a typical length of the problem. If U_∞ and L are used to nondimensionalize the coordinates and the velocities, the steady boundary layer equations, for a uniform outer flow over a flat plate, become

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \tag{1}$$

$$u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \tag{2}$$

where the notation is classical. The coordinate y and the velocity component v have been stretched with the square root of the Reynolds number, $Re = U_\infty L/\nu$, where ν is the kinematic viscosity of the fluid.

The equations should be solved with appropriate boundary and initial conditions. In this study, we are interested in the distortion of velocity profile of the boundary layer caused by a distributed suction applied at the wall. For our problem, the perturbation on the plate(y=0), is described by the following boundary conditions

$$u(x,0) = 0, \quad \text{and} \quad v(x,0) = v_w(x). \tag{3a, b}$$

In the outer edge of the boundary layer, we have

$$u(x,y) \to 1, \quad \text{as} \quad y \to \infty. \tag{4}$$

The inflow conditions are specified by

$$u(x_0,y) = u_B(y), \quad \text{and} \quad v(x_0,y) = v_B(y), \tag{5a, b}$$

to represent incoming Blasius flow at some x_0 in the streamwise direction.

A coordinate transformation is now introduced by defining the new independent variables

$$\xi = x, \quad \text{and} \quad \eta = y/\sqrt{x}, \tag{6a, b}$$

and the new dependent variables

$$F = u, \quad \text{and} \quad V = v\sqrt{\xi} - \frac{1}{2}F\eta, \tag{7a, b}$$

for the velocity components in the ξ and η directions respectively. In terms of the new variables, the continuity and momentum equations become

$$\xi\frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} + \frac{F}{2} = 0, \tag{8}$$

$$\xi F\frac{\partial F}{\partial \xi} + V\frac{\partial F}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}. \tag{9}$$

The solution can be written as the basic Blasius flow plus the perturbation solution,

$$u = u_B + u', \quad \text{and} \quad v = v_B + v', \tag{10a, 10b}$$

in transformed variables,

$$F = F_B + G = u_B + u', \tag{11a}$$

$$V = V_B + E = (v_B + v')\sqrt{\xi} - \frac{1}{2}(u_B + u')\eta. \tag{11b}$$

where we introduce $G = F'$ and $E = V'$ for convinience. Substituting Eqs.(11a,b) in Eqs.(8, 9) and using the fact that the Blasius solution satisfies the steady boundary layer equations with standard boundary conditions for flat plate flow, we have the equations for perturbation:

$$\xi\frac{\partial G}{\partial \xi} + \frac{\partial E}{\partial \eta} + \frac{G}{2} = 0, \tag{12}$$

$$\xi F_B\frac{\partial G}{\partial \xi} + V_B\frac{\partial G}{\partial \eta} + E\frac{\partial F_B}{\partial \eta} + \xi G\frac{\partial G}{\partial \xi} + E\frac{\partial G}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 G}{\partial \eta^2}. \tag{13}$$

As the perturbations are assumed small, the quadratic terms of perturbation velocity are initially neglected. Considering the similarity of Blasius solution, F_B is independent of the streamwise coordinate, Eq.(13) is written as follows,

$$\xi F_B\frac{\partial G}{\partial \xi} + V_B\frac{\partial G}{\partial \eta} + E\frac{\partial F_B}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 G}{\partial \eta^2}. \tag{14}$$

with the following boundary conditions

$$G(\xi,0) = 0, \quad \text{and} \quad E(\xi,0) = \sqrt{\xi}v_w(\xi). \tag{15a, b}$$

$$G(\xi_0,\eta) = 0), \quad \text{and} \quad E(\xi_0,\eta) = 0, \tag{16a, b}$$

$$G(\xi,\eta) \to 0, \quad \text{as} \quad \eta \to \infty. \tag{17}$$

3. INTEGRAL TRANSFORM OF THE EQUATIONS

Following the formalism in the generalized integral transform technique, for the solution of the problem defined by Eqs.(12,14) and associated boundary conditions, the appropriate auxiliary eigenvalue problem is given by:

$$\frac{d^2\psi_i(\eta)}{d\eta^2} + \mu_i^2\psi_i(\eta) = 0, \qquad 0 < \eta < H \tag{18a}$$

with the boundary conditions,

$$\psi_i(0); \qquad \psi_i(H) = 0, \tag{18b, c}$$

where the freestream boundary condition (17) is applied at a distance H normal to the plate, sufficient far from the wall, and ψ_i is the eigenfunction and μ_i its corresponding eigenvalue.

The auxilary problem allows to definition of the following integral transform pair:

Integral transform:

$$G_i(\xi) = \int_0^H \frac{\psi_i(\eta)}{N_i^{\frac{1}{2}}} G(\xi,\eta)d\eta, \tag{19a}$$

Inverse:

$$G(\xi,\eta) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\psi_i(\eta)}{N_i^{\frac{1}{2}}} G_i(\xi), \tag{19b}$$

and the normalization integral N_i is obtained from

$$N_i = \int_0^H \psi_i^2(\eta)d\eta. \tag{20}$$

The transversal velocity is obtained by integrating the continuity equation along η,

$$E(\xi,\eta) = \sqrt{\xi}v_w(\xi) - \int_0^\eta \left(\xi\frac{\partial G}{\partial \xi} + \frac{G}{2}\right)d\eta, \tag{21}$$

substituting the inverse, Eq.(19b), we have then

$$E(\xi,\eta) = \sqrt{\xi}v_w(\xi) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{N_j^{\frac{1}{2}}} f_k(\eta)(\xi\frac{dG_k}{dx} + \frac{G_k}{2}), \tag{22}$$

where

$$f_k(\eta) = \int_0^\eta \psi_j(\eta')d\eta'. \tag{23}$$

Multiplying both sides of the equation by $\psi_i(\eta)$ and integrating along the normal direction between the limits 0 e H,

$$\frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}}}\left[\int_0^H \psi_i\xi F_B\frac{\partial G}{\partial \xi}d\eta + \int_0^H \psi_i\xi V_B\frac{\partial G}{\partial \eta}d\eta\right.$$

$$+\int_0^H \psi_i E \frac{\partial F_B}{\partial \eta} d\eta \Big] = -\mu_i^2 \bar{G}_i. \tag{24}$$

The inverse formula (19a) and the expression for the transversal velocity (22) are then used, resulting in an infinite system of coupled ordinary differential equations

$$\xi \sum_{j=1}^{\infty} (A_{ij} - C_{ij}) \frac{d\bar{G}_j}{d\xi} + \sum_{j=1}^{\infty} (B_{ij} - \frac{1}{2} C_{ij}) \bar{G}_j$$

$$+ D_i \sqrt{\xi} v_w(\xi) = -\mu_i^2 \bar{G}_i, \tag{25}$$

where

$$A_{ij} = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^H F_B \psi_i(\eta) \psi_j(\eta) d\eta, \tag{26a}$$

$$B_{ij} = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^H V_B \psi_i(\eta) \psi_j'(\eta) d\eta. \tag{26b}$$

$$C_{ij} = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}}} \int_0^H \frac{dF_B}{d\eta} \psi_i(\eta) f_j(\eta) d\eta, \tag{26c}$$

$$D_i = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}}} \int_0^H \frac{dF_B}{d\eta} \psi_i(\eta) d\eta, \tag{26d}$$

The coefficients A_{ij}, B_{ij}, C_{ij} and D_i are calculated by numerical integration once the Blasius solution is given.

By defining

$$A_{ij} = A_{ij} - C_{ij}, \tag{27a}$$

$$\bar{B}_{ij} = B_{ij} - \frac{C_{ij}}{2} + \delta_{ij} \mu_i, \tag{27b}$$

$$\bar{D}_i = -D_i, \tag{27c}$$

the equations can be written in a more compacted form

$$\xi \sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \frac{d\bar{G}_j}{d\xi} + \sum_{j=1}^{\infty} \bar{B}_{ij} \bar{G}_j = \bar{D}_i \sqrt{\xi} v_w(\xi). \tag{28}$$

3.2 Nonlinear Equation (12)

Applying the same integral transform procedure to Eq.(12), we have the following infinite system of coupled nonlinear ordinary differential equations:

$$\xi \sum_{j=1}^{\infty} (A_{ij} - C_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} (\tilde{A}_{ijk} - \tilde{C}ijk) \bar{G}_k) \frac{d\bar{G}_j}{d\xi}$$

$$+ \sum_{j=1}^{\infty} (B_{ij} - \frac{1}{2} C_{ij} - \frac{1}{2} \tilde{C}_{ijk} \sum_{k=1}^{\infty} G_k) \bar{G}_j$$

$$+ (D_i + \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{D}_{ik} \bar{G}_k) \sqrt{\xi} v_w(\xi) = -\mu_i^2 \bar{G}_i, \tag{29}$$

where

$$A_{ijk} = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}} N_k^{\frac{1}{2}}} \int_0^H \psi_i(\eta) \psi_j(\eta) \psi_k(\eta) d\eta, \tag{30a}$$

$$\tilde{C}_{ijk} = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_j^{\frac{1}{2}} N_k^{\frac{1}{2}}} \int_0^H \psi_i(\eta) f_j(\eta) \psi_j'(\eta) d\eta, \tag{30b}$$

$$\tilde{D}_{ik} = \frac{1}{N_i^{\frac{1}{2}} N_k^{\frac{1}{2}}} \int_0^H \psi_i(\eta) \psi_k'(\eta) d\eta, \tag{30c}$$

If we introduce

$$\bar{A}_{ij}(\bar{G}) = A_{ij} - C_{ij} + \sum_{k=1}^{\infty} (\tilde{A}_{ijk} - \tilde{C}ijk) \bar{G}_k, \tag{31a}$$

$$\bar{B}_{ij}(\bar{G}) = B_{ij} - \frac{C_{ij}}{2} - \frac{1}{2} \tilde{C}_{ijk} \sum_{k=1}^{\infty} \bar{G}_k + \delta_{ij} \mu_i, \tag{31b}$$

$$\bar{D}_i(\bar{G}) = -D_i + \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{D}_{ik} \bar{G}_k, \tag{31c}$$

the equations can be written in a more compacted form

$$\xi \sum_{j=1}^{\infty} \bar{A}_{ij}(\bar{G}) \frac{d\bar{G}_j}{d\xi} + \sum_{j=1}^{\infty} \bar{B}_{ij}(\bar{G}) \bar{G}_j = \bar{D}_i(\bar{G}) \sqrt{\xi} v_w(\xi). \tag{32}$$

It should be noted that although the two systems are written in similar forms, there exists fundamental difference between them. In the last system, as the coefficients are functions of $\bar{G}_k$ which varies along x, $\bar{A}_{ij}$, $\bar{B}_{ij}$ and $\bar{D}_i$ vary with the streamwise coordinate also. Implication of this difference will be fully understood in the numerical treatment of the systems.

4. THE APPROXIMATE ANALYTICAL SOLUTION

It would be extremely convenient to have explicit expressions available, though approximate, that would allow for parameter and asymptotic inspections without a complete numerical solution of the problem. This approach allows for the establishment of explicit expressions, so called lowest order solutions, based on neglecting the contribution of non-diagonal elements in the coefficient matrices on Eq.(28),

$$\xi \bar{A}_{ii} \frac{d\bar{G}_j}{d\xi} + \bar{B}_{ii} \bar{G}_j = \bar{D}_i \sqrt{\xi} v_w(\xi), \tag{33}$$

Now the equations are decoupled and thus can be solved independently. Let us define

$$a_i = \frac{\bar{B}_{ii}}{\bar{A}_{ii}}, \quad b_i = \frac{\bar{D}_i}{\bar{A}_{ii}}, \tag{34a, b}$$

The decoupled set of equations can be written as

$$\frac{d\bar{G}_i}{d\xi} + \frac{a_i}{\xi}\bar{G}_i = \frac{b_i v_w(\xi)}{\sqrt{\xi}}. \tag{35}$$

with a_i and b_i being constants determined by the Blasius solution and eigenfunctions. The solution of the first order ordinary equations are straightforward.For the general case, the solution can be written as the sum of the general homegeneous solution and a particular non-homogeneous solution. The general solution of the equation is

$$\bar{G}_i = \xi^{-a_i}\left(\int_{\xi_0}^{\xi} d_i v_w(\xi')\xi'^{(a_i-\frac{1}{2})}d\xi'\right) \tag{36}$$

5. NUMERICAL SOLUTION

For purpose of computation, the infinite set of coupled equations is substituted by a sufficiently large finite dimensional system, by truncating it at N^{th} row and column

$$\xi\sum_{j=1}^{N}\bar{A}_{ij}\frac{d\bar{G}_j}{d\xi} + \sum_{j=1}^{N}\bar{B}_{ij}\bar{G}_j = \bar{D}_i\sqrt{\xi}v_w(\xi), \tag{37}$$

to be solved with the initial conditions $\bar{G}_i(\xi_0)$ represent the upstream boundary condition and can be obtain by applying integral transform to the upstream boundary condition. In matrix notation, we can write

$$\xi\mathbf{A}\frac{d\mathbf{G}}{d\xi} + \mathbf{BG} = \mathbf{D}\sqrt{\xi}v_w(\xi), \tag{38}$$

5.1 Linear System

In the linear system, the A, B, D are constants can be determined independent of the solution. We can transform the equation by multiplying the inverse of $\mathbf{A}$, $\mathbf{A}^{-1}$,

$$\frac{d\mathbf{G}}{d\xi} = -\frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{BG}}{\xi} + \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{D}v_w(\xi)}{\sqrt{\xi}}. \tag{39}$$

with the initial conditons $\mathbf{G}(\xi_0)$.

This system can be integrated explicitly along the streamwise direction using standard subroutines provided by mathematical libraries such as IMSL and Numerical Recipe.

5.2 Nonlinear System

In the nonlinear system, the system can not be made explicit in the derivative of transformed field before the integration by matrix inversion. Such inversion must be made at each streamwise step, thus introducing huge computational cost.

6. RESULTS AND DISCUSSION

The decay behavior of the approximate solution can be better visualized in Fig.1, where we show three-dimensional representation of the perturbation velocity distribution.

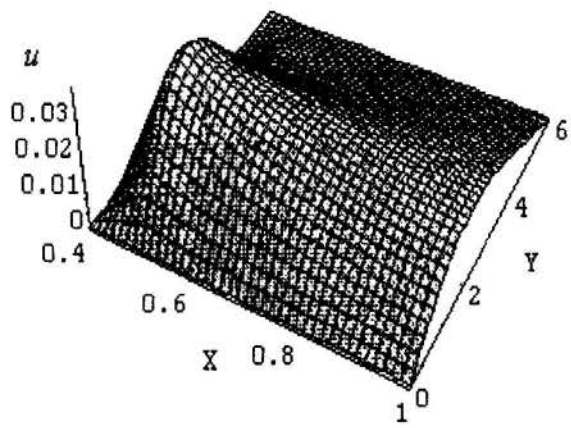


Fig.1 Distribution of Perturbation Velocity

This qualitative algebraic decay is confirmed by hybrid analytic-numerical solution of the complete system, as shown in Fig.2 and 3.

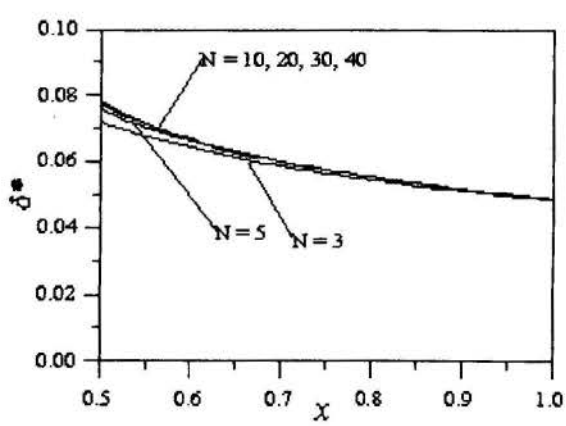


Fig.2 Perturbated boundary layer displacement thickness.

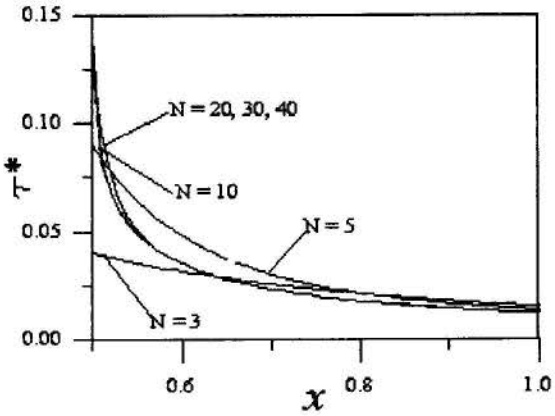


Fig.3 Convergence behavior of perturbated skin friction

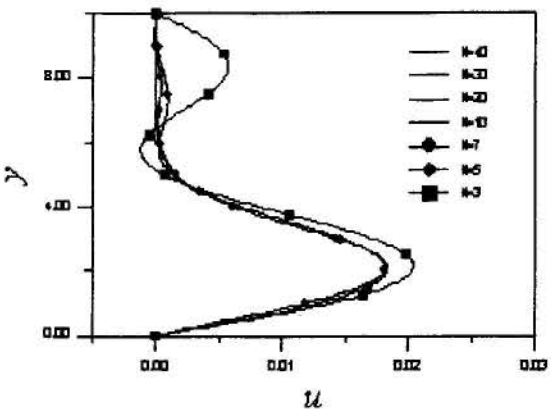


Fig.4 Convergence behavior of perturbated velocity profile

The convergence of the complete solution is shown in Fig.2 through Fig.4. We can see that with 10 terms we can get a converged solution, which is nearly indistinguishable from the solution with 40 terms. We can observe that the perturbated boundary layer displacement thickness has quicker convergence than the perturbated skin friction for small value of streamwise coordinate, while for large value of x, the skin friction has a better convergence behavior. In Fig.4 we can observe the Gibbs phenomenon for small number of truncation terms($N = 3, 5, 7$). The Gibbs phenomenon desappeared with increased trunction terms. We can concluded that the Generalized Integral Transform Technique can be used to semi-infinite domain problem without presence of Gibbs phenomenon if sufficient large terms is used.

7. CONCLUSION

An hybrid analytic-numerical procedure is proposed for solution of the two-dimension boundary layer equations. We first solved the linearized boundary layer equations for perturbation to a basic Blasius flow when subject to distributed suction at the wall. After the infinite set of coupled ordinary differential equations are obtained by applying the generalized integral transform, we suggested an approximate lowest order solution to a decoupled system through neglecting all non-diagonal terms. The qualititave behavior of the approximate analytic solution is confirmed by hybrid analytic-numerical solution of the complete linear system. We have shown the convergence of the solution by results of perturbated boundary layer displacement thickness and skin friction and velocity profile. We also suggest how to recover the neglected nonlinear terms. The formal development is given. Numerical procedure similar to that for linear system is shown. However, the computational cost would be much higher as matrix inversion must be made at each integration step.

ACKNOWLEDGMENT The author is grateful to Prof. M. D. Mikhailov, Drs. R. M. Cotta and Atila P. Silva Freire for helpful discussions. He is grateful to CNPq for the financial help received during the preparation of this work.

REFERENCES

Cotta, R.M.(1993) *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*, CRC Press, Boca Raton.

Gaster, M. (1995). Private communication.

Lage, P.L.C. and Rangel,R.H.(1994) Generalized Integral Transform Solution for Boundary Layer Flow over a Sphere, *Int. J. Num. Meth. Fluids*, **18**, 721–731.

Linnick, M.N. (1995) *The Influence of Slot Suction on Boundary layer Instability*, M.Phil. Dissertation, Cambridge University Engineering Department, UK.

Su, J. (1993) *Um Estudo Analítico-Numérico da Estabilidade de Camadas Cisalhantes*, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ.

ANÁLISE DO CUSTO COMPUTACIONAL PARA UM MODELAMENTO ANALÍTICO-NUMÉRICO DE CONVECÇÃO.

Sérgio Wortmann
Coordenação de Mecânica
Escola Técnica Federal da Paraíba
Av. 1° de Maio, 720, Jaguaribe
58015-430 João Pessoa - Pb.

Carlos A. C. Santos
Universidade Federal da Paraíba
Laboratório de Energia Solar
58059-900, Cidade Universitária,
João Pessoa - Pb.

RESUMO

O principal objetivo deste trabalho é de analisar o custo computacional de um algoritmo numérico para a solução de um problema de convecção forçada laminar, transiente, em um canal de placas planas paralelas, com escoamento em desenvolvimento simultâneo térmico e hidrodinâmico. A solução deste problema foi obtida a partir da Técnica de Transformada Integral Generalizada (GITT.)

INTRODUÇÃO

O estudo da convecção forçada transiente tem, mais recentemente, recebido considerável atenção, especialmente nas aplicações de trocadores de calor. O assunto apresenta uma maior relevância nas análises das respostas temporais de sistemas dinâmicos, para os quais são requeridos dispositivos automáticos de controle. Em muitas dessas aplicações, os transientes iniciais podem ser desprezados, só interessando as soluções quasi estáticas que são usadas para fornecer as respostas do sistemas submetidos a perturbações periódicas na entrada.

A literatura aberta registra que os trabalhos publicados estão concentrados nas análises de escoamentos com o perfil hidrodinâmico desenvolvido (Siegel e Sparrow 1958 e 1959; Kakaç 1975; Cotta e Ösisic 1986; Santos e Cotta 1988; Santos 1990; Kakaç et al. 1989 e 1990; Aparecido e Cotta 1990) e uma grande lacuna relativa aos escoamentos com desenvolvimento simultâneo.(Cotta e Carvalho 1991; Machado 1992) apresentam estudos híbridos analíticos-numéricos, através do uso da técnica da transformada integral generalizada, para o escoamento laminar em desenvolvimento simultâneo no estado permanente.

No presente trabalho a técnica de transformada integral generalizada é estendida para análise da convecção transiente laminar no escoamento em desenvolvimento simultâneo, em um canal de placas planas paralelas submetido a variações periódicas na entrada. O campo de temperatura, como uma quantidade complexa, é analisado na forma dividida com as partes real e imaginária. O aumento do número de parâmetros envolvidos na análise exige uma preocupação maior com o custo computacional. Este trabalho tem com objetivo específico um estudo da importância das variáveis que influenciam no tempo de processamento e na precisão dos resultados, que avaliam quantidades de interesse prático como temperatura média global e o número de Nusselt.

DEFINIÇÃO DO PROBLEMA:

Trata-se de um problema de convecção forçada laminar e transiente em um canal de placas planas paralelas com escoamento em desenvolvimento térmico e hidrodinâmico simultâneo. Para o equacionamento matemático deste problema foram adotadas as seguintes hipóteses simplificadoras: escoamento laminar, bidimensional e simétrico em relação ao eixo central entre as duas placas. Regime transiente. Fluido incompressível, com propriedades físicas constantes, com dissipação viscosa desprezível e sem condução axial. Para este modelamento foi adotada a aproximação da camada limite de Prandtl.

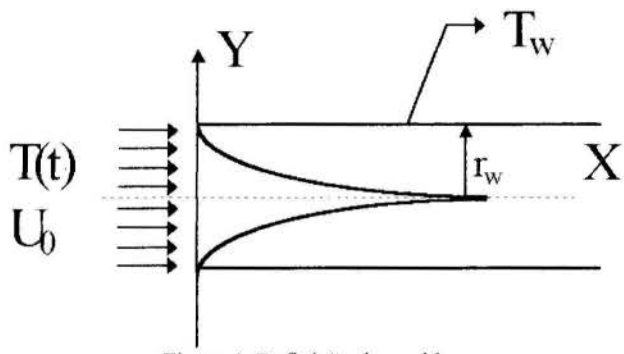


Figura 1: Definição do problema.

No equacionamento do problema, a componente axial do campo de velocidade, U(X,Y), foi separada em duas. Uma desenvolvida, U∞(Y), e outra em desenvolvimento, U*(X,Y), como demonstram as eq.(1) e (2). Dessa forma, somente na região de entrada térmica é que U*(X,Y) é diferente de zero. No restante do domínio U(X,Y) vai ser igual a U∞(Y).

$$U(X,Y) = U^*(X,Y) + U\infty(Y) \qquad (1)$$

$$U\infty(Y) = \frac{3}{2}(1 - Y^2) \qquad (2)$$

Por isso na Eq.(4) aparecem dois tipos de velocidades axiais. Tal procedimento, é recomendado por Machado (1992), porque melhora sensivelmente a convergência da integração numérica.

Portanto, as equações ficam da seguinte forma:

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial U^*(X,Y)}{\partial X} + \frac{\partial V(X,Y)}{\partial Y} = 0 \qquad (3)$$

Equação do Momentum:

$$(U^* + U\infty)\frac{\partial U^*}{\partial X} + V\left[\frac{\partial U}{\partial Y} - 3Y\right] = -\left[\frac{dP^*}{dX} + \frac{3}{Re}\right] + \frac{1}{Re}\frac{\partial^2 U^*}{\partial Y^2} \qquad (4a)$$

onde:

$$0 < Y < 1 \text{ e } X > 0 \qquad (4b)$$

Condições Iniciais e de Contorno:

$$U^*(0,Y) = 1 - U\infty(Y) \; ; \quad U^*(X,1) = 0 \; ; \qquad (4c,d)$$

$$\left.\frac{\partial U^*}{\partial Y}\right|_{Y=0} = 0 \; ; \quad V(0,Y) = 0 \; ; \qquad (4e,f)$$

$$V(X,1) = 0 \; ; \quad V(X,0) = 0 \; . \qquad (4g,h)$$

Os grupos adimensionais usados são os seguintes:

$$Y = \frac{y}{r_w}$$

$$X = \frac{x}{r_w}$$

$$U = \frac{u}{u_0}$$

$$V = \frac{v}{u_0}$$

$$P^* = \frac{P}{\rho(u_0)^2} \qquad (5)$$

$$Re = \frac{u_0 r_w}{\upsilon}$$

$$\theta = \frac{T - T_w}{T_0 - T_w}$$

$$Pe = Re\,Pr$$

$$Pr = \frac{\upsilon}{\alpha}$$

No campo da temperatura foi utilizado o "método das variáveis complexas dependentes" (Arpaci, 1984) que transforma a equação da energia em duas equações acopladas. Conseqüentemente os potenciais de temperatura passam a ser expressos, também, no campo complexo, com sua parte real (R) e imaginária (I). A condição inicial, com este artifício matemático, pode ser avaliada para grandes valores de tempo, simplificando, sensivelmente, o equacionamento matemático. Esta simplificação não traz prejuízos nos resultados porque o problema é em regime transiente e deve ser estudado para altos valores da variável temporal. Portanto, as equações ficam da seguinte forma:

$$(U^* + U\infty)\frac{\partial R}{\partial X} + V\frac{\partial R}{\partial Y} = \frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 R}{\partial X^2} + \frac{\Omega I}{Pe} \qquad (6a)$$

Cujas condições de contorno são:

$$\left.\frac{\partial R}{\partial Y}\right|_{Y=0} = 0 \; ; \quad R(X,1,\tau) = R_W(X,\tau) \qquad (6b,c)$$

$$(U^* + U\infty)\frac{\partial I}{\partial X} + V\frac{\partial I}{\partial Y} = \frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 I}{\partial X^2} \frac{\Omega R}{Pe} \qquad (7a)$$

Cujas condições de contorno são:

$$\left.\frac{\partial I}{\partial Y}\right|_{Y=0} = 0 \; ; \quad I(X,1,\tau) = I_W(X,\tau) \qquad (7b,c)$$

A avaliação do custo computacional da solução analítico-numérica de um problema tem suas particularidades. Uma rápida análise nos algoritmos resultantes da aplicação da GITT, sugere que o tempo de processamento computacional está intimamente relacionado com o custo da integração numérica do sistema de EDO resultante da transformação integral do problema original. A execução desta tarefa está a cargo de bibliotecas científicas de subrotinas numéricas (IMSL, 1990). Desta forma fica impossível verificar, por exemplo, o número de operações envolvidas na solução, já que se trata de pacotes comerciais de acesso limitado. Portanto, adotou-se o tempo de processamento computacional como forma de avaliação do custo computacional.. Para que o confrontamento entre os vários resultados fosse possível, foi utilizado um caso como padrão. A cada tomada de tempo este caso sofria a modificação de uma única variável. Os estudos foram feitos alterando, individualmente, os seguintes parâmetros: Coordenada Axial, Número de Autovalores e Erro Relativo para integração numérica. Já o Número de Reynolds, o Número de Prandtl e a freqüência adimensional, foram mantidos constantes durante todo o estudo. Os valores adotados foram os seguintes: Re:2000; Pr:0,72 e Ω:0,1.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Antes de proceder a análise dos resultados obtidos, é preciso lembrar que vários são os fatores que influenciam o tempo de processamento computacional. Logo, os resultados aqui apresentados tem caráter comparativo entre si. Evidentemente se procurou manter constante todas as formas de influência no custo computacional que não as estudadas. Com isso, pode se garantir qualitativamente a comparação entre os vários casos, embora seja impossível garantir sua reprodução fiel para situações diferentes daquelas em que foram obtidos.

O equipamento utilizado foi do tipo PC 486 DX2 com "Clock" de 66 MHz.

No caso do padrão, o tempo de processamento numérico foi de 640s (10':40") e a amplitude da temperatura média resultante foi 0,809209. Estes valores foram obtidos para os seguintes dados de entrada: Coordenada axial: X+=2,5; número de autovalores: 25 e erro relativo para integração numérica: 1,0E-4.

Na figura 2 é avaliado o tempo de CPU utilizado em função da variação do erro relativo TOL para integração numérica, onde TOL é o erro absoluto adotado na chamada da subrotina DGEAR (IMSL, 1990).

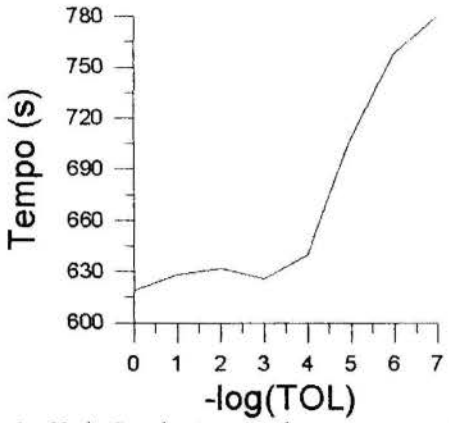


Figura 2: Variação do tempo de processamento computacional em função da precisão adotada (TOL).

Verifica-se que o custo computacional aumenta pouco quando o erro admitido varia até -log(TOL) = 4. A partir daí a variação passa a ser mais importante. Mesmo assim, este é o parâmetro que apresentou menor influência no tempo de processamento. Donde se conclui que, nos intervalos avaliados, aumento da precisão é o que menos compromete o tempo de CPU necessário para a obtenção dos resultados.

Na figura 3 apresenta-se a análise do custo computacional para a variação do número de autovalores usados na solução das equações da temperatura e velocidade. Ao contrário do caso anterior, vê-se uma inclinação acentuada e crescente da curva. Significando que, para um aumento do número de autovalores, o tempo de processamento aumenta muito. É preciso lembrar que este é um problema acoplado e o aumento de um autovalor significa três equações diferenciais a mais na solução numérica. Por isso esta análise é bastante particular.

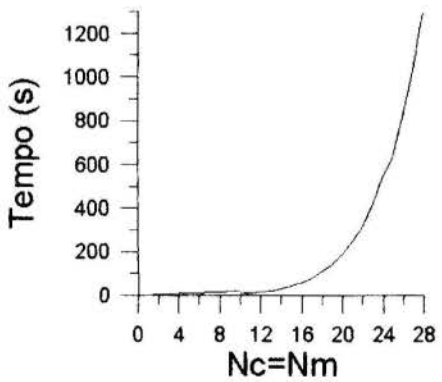


Figura 3: Tempo de processamento computacional em função do número de autovalores usados.

Para um caso mais geral é apresentada a figura 4 que relaciona o tempo de processamento com o número de equações diferenciais resolvidas numericamente. Nota-se que a curva tem menores inclinações, quando comparada com a curva da figura 3, porém continua sendo este o parâmetro mais importante no que se refere ao custo computacional. A partir do exposto, fica nítida a necessidade de um procedimento adaptativo de aceleração de convergência que tem ainda a vantagem de garantir o controle automático da precisão.

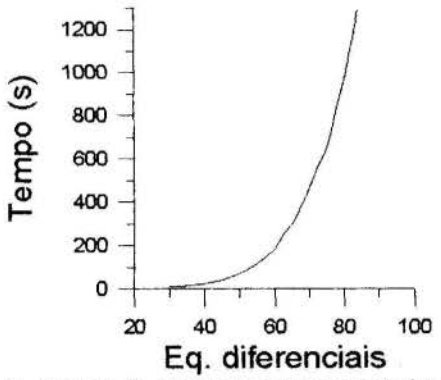


Figura 4: Tempo de processamento computacional versas número de equações diferenciais resolvidas numericamente.

Na figura 5 o tempo de processamento foi plotado em relação a vários pontos da coordenada axial X+, onde X+ é a coordenada axial do escoamento definida por Shah e London (1978) como sendo:

$$X+ = 10^3 \frac{x}{D_h \, Re} \tag{8}$$

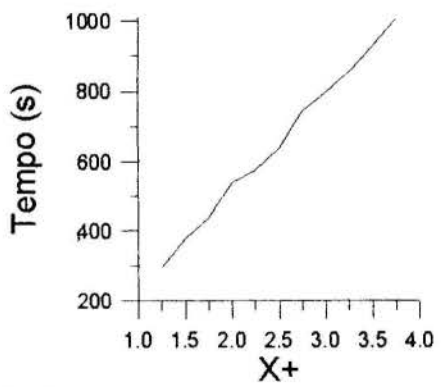


Figura 5: Tempo de processamento computacional versas valores da coordenada axial.

Pode-se dizer que a variação é praticamente linear. Como a inclinação da curva é próxima dos 45 graus, é de se concluir que para um aumento de X+ o tempo aumenta quase na mesma proporção. Mais uma vez, deve-se evidenciar a necessidade do procedimento adaptativo de aceleração da convergência. O aumento de X+ compromete o custo computacional. Porém a solução exige menos autovalores. Portanto se por um lado o tempo de processamento aumenta devido à posição axial, por outro, diminuirá sensivelmente porque o número de equações diferenciais a serem resolvidas é menor.

As tabelas 1 e 3 tem relação com as figuras 1 e 4, respectivamente. Enquanto a tabela 2, relaciona-se com as figuras 2 e 3. Tais tabelas são incluídas, para que se possa verificar o comportamento da resposta numérica, quando foram variados os parâmetros para estudo dos tempos de processamento.

Na tabela 2, pode ser visto o número de autovalores utilizados em cada processamento e a conseqüente quantidade de equações diferenciais resolvidas. Verifica-se que, para resultados de engenharia, o método se apresenta bastante conservativo. Caso seja este o objetivo do seu uso, deve se optar por um menor número de autovalores e um erro relativo menor na integração numérica. Assim o custo computacional ficará sensivelmente minimizado.

Tabela 1: Análise do tempo de processamento computacional e precisão dos resultados para a variação da precisão requerida.

TOL	T (s)	Ampl. de θ
1,0E0	619	0,808683
1,0E-1	628	0,809309
1,0E-2	632	0,809132
1,0E-3	626	0,809133
1,0E-4	640	0,809209
1,0E-5	709	0,809236
1,0E-6	758	0,809245
1,0E-7	780	0,809240

Tabela 2: Tempo de processamento computacional e precisão dos resultados em função do número de autovalores usados na solução problema.

NC= NM	Eq. dif.	T. (s)	Ampl. de θ
10	30	8	0,809674
11	33	11	0,809537
12	36	15	0,809447
13	39	20	0,809117
14	42	30	0,809323
15	45	42	0,809035
16	48	60	0,809241
17	51	78	0,809227
18	54	110	0,809209
19	57	140	0,809202
20	60	187	0,809207
21	63	254	0,809194
22	66	313	0,809204
23	69	420	0,809202
24	72	541	0,809205
25	75	640	0,809208
26	78	834	0,808971
27	81	1031	0,809214
28	84	1296	0,809211

Tabela 3: Tempo de processamento computacional verificado para vários pontos na coordenada axial.

X+	T. (s)	Ampl. de θ
3.75	1003	0.760236
3.5	928	0.769432
3.25	853	0.778894
3.0	795	0.788651
2.75	745	0.798740
2.5	640	0.809209
2.25	576	0.820114
2.0	539	0.831530
1.75	435	0.843555
1.5	380	0.856324
1.25	294	0.870030

Na tabela 3, é de se esperar que os valores da amplitude da temperatura mudem a cada processamento. Trata-se de novos valores de X+ e, conseqüentemente, novas respostas no campo térmico. Estão registrados para que se possa ter uma idéia do intervalo avaliado e não propriamente para confrontamento

Referente a este trabalho, é importante ter em mente que as análises e conseqüentes conclusões só são rigorosamente verdadeiras para os intervalos avaliados. Porém, a prática tem demonstrado que podem ser estendidas para outros casos que não tenham sido aqui estudados.

CONCLUSÃO:

Estudar o tempo de processamento é fundamental para a ampliação do uso deste método. Isto porque pode-se encontrar uma mesma precisão nos resultados obtidos com menor tempo de processamento e consumo de memória computacional. Dessa forma, pode ser possível utilizar esta poderosa ferramenta, cuja segurança nos resultados é bastante comprovada, de forma cada vez mais eficiente e econômica. Estes fatores são de suma importância para quem estiver interessado em usar essa ferramenta de forma corriqueira tanto para fins tecnológicos como científicos. Outra vantagem desse estudo é que ele pode servir de base para o desenvolvimento futuro de uma biblioteca científica de subrotinas numéricas que usem a GITT.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Arpaci,V.S. e Larsen, P.S.;"Convection Heat Transfer"; **Pince-Hall International**, London, 1984.

Aparecido, J.B. e Cotta, R,M.: "Thermally Developing Laminar Flow Inside Rectangular Ducts", **Int. J. Heat & Mass Transfer**, V. 33, no 2, pp. 341-347 (1990).

Cotta, R.M. e Ösisik, M.N.; "Laminar Forced Convection in Ducts With Periodic Variation of Inlet Temperature", **Int. J. Heat & Mass Transfer**, V. 29, no 10, pp. 1495-1501 (1986).

Cotta, R.M. e Santos, C.A.C.; "Transient Diffusion Problems with Time-Dependet Boundary Condition Coefficients", **J. Eng. Physics**, em impressão.

Cotta, R.M., e Carvalho, T.M.B.; "Hybrid Analysis of Boudary Layer Equations for Internal Flow Problems", 7TH Int. **Conf. on Num. Meth. in Laminar & Turbulent Flow**, Stanford, CA, julho (1991).

Cotta, R.M.;"Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow"; **CRC Press**, Boca Raton, Florida, 1993.

Gondin, R.R., "Solução Analítica e o Estudo Paramétrico para a Convecção Forçada em Tubos Aletados", **UFPB**, João Pessoa, 1992.

IMSL Library, Math/Lib., Huoston, Texas (1990).

Kakaç, S., Li, W., e Cotta, R.M.; "Theorical and Experimental Study of Transient Laminar Forced Convection in Duct with Timewise Variation or Inlet Temperature", **ASME Winter Annual Meeting**, HTD, V. 123, pp. 57-63, San Francisco (1989).

Kakaç, S.; "A General Analytical Solution to the Equation of Transient Forced Convection with Fully Developed Flow"; **Int. J. Heat Mass Tranfer**, Vol. 18, p. 1449, 1453, 1975.

Li, W. e Kakaç, S.; "Unsteady Thermal Entrance Heat Transfer in Laminar Flow with a Periodic Variation of Inlet Temperature"; **under publication of Int J. Heat and Mass Transfer**, 1990.

Machado, H.A., "Solução Híbrida Numérica-Analítica para as Equações de Camada Limite em Convecção Interna", **COPPE**, Rio de Janeiro, 1992.

Santos, C.A.C., "Soluções Analíticas Para a Convecção Forçada Laminar em Tubos Circulares Externamente Aletados", **ITA**, São José dos Campos, 1990.

Santos, C.A.C., Cotta, R.M. e Ôsisik, M.N.; "Laminar Forced Convection Inside Externally Finned Tubes", **Anais do 2o Encontro de Ciências Térmicas - ENCIT 88**, pp. 87-90, Rio de Janeiro (1988).

Shah, R.K. e London, A.L. "Laminar flow Forced Convection in Ducts", Supplement 1, **Advances in heat Transfer**, Academic, New York, 1978.

Siegel, R. e Sparrow, E.M.; "Transient Heat Transfer for Laminar Forced Convection in the Thermal Entrance Region or Flat Ducts"; **Trans. ASME, J. Heat Transfer**, Vol. 81, p. 29-36, 1959.

Sparrow, E.M. e Siegel, R.; "Thermal Entrance Region of a Circular Tube under Transient Heating Condition"; **Proc. of the Third U.S. Nat. Cong. off App. Mech**, p.871-826, 1958.

Wortmann, S. "Convecção Forçada Laminar entre Placas Planas Paralelas em Regime Transiente com Desenvolvimento Simultâneo", Tese M.Sc. **UFPb.**, João Pessoa, 1995.

ABSTRACT

In the present work the generalized integral transform technique is extended to analyze the laminar transient convection, in simultaneous developing flow, in parallel-plate channels subject to a periodic variation on the inlet temperature profile. The tempeture field like a complex quantity is analyzed in two parts. Real and imaginary. The increase on the involved parameters in the analyze needs a bigger attention about the computational cost. This work has as specific objective to the survey of the variable importance that make influence in the time processing and results precision, that evaluate practical interest quantities, such as, bulk temperature and Nusselt Numbers

ANÁLISE DE FLUXOS PARA PROBLEMAS DE POTENCIAL COM O MÉTODO DA FUNÇÃO DE GREEN LOCAL MODIFICADO (MLGFM)

Renato Barbieri e Pablo Andrés Muñoz R.
Laboratório de Mecânica Computacional - LAMEC
Departamento de Engenharia Mecânica - DEM
Faculdade de Engenharia de Joinville - FEJ
e@mail: dem2rbb@dcc.fej.udesc.br

RESUMO

O Método da Função de Green Local Modificado (MLGFM) é uma técnica integral que tem sido utilizada para solução de diversos problemas da Mecânica do Contínuo. Este método pode ser entendido como sendo uma extensão do Método de Elementos de Contorno de Galerkin, e sua principal característica é explorar as propriedades de uma Função de Green associada ao problema, sem o seu conhecimento explícito. Apresenta-se neste trabalho o formalismo e implementação numérica do MLGFM para problemas de potencial e os exemplos numéricos são para demonstrar a convergência para fluxos, tempo de processamento e aplicação do método para problemas anisotrópicos.

INTRODUÇÃO

O Método da Função de Green Local Modificado (MLGFM) é uma nova técnica integral com origem nos trabalhos de Burns & Dorning (1973,74,75), Lawrence & Dorning (1978a,b) e Horak & Dorning (1978). Estes pesquisadores formularam o LGFM (Local Green's Function Method) e utilizaram a técnica principalmente para a solução de problemas de transferência de calor, mecânica dos fluídos e difusão de nêutrons.

No final da década de 80, o prof. Luiz Henry Monken e Silva, orientado de doutorado do prof. Clóvis Sperb de Barcellos, reformula o LGFM, introduzindo algumas modificações e passa a denominar a nova técnica de MLGFM. A primeira publicação com esta denominação aparece em 1987, Silva & Barcellos, com uso do método para a solução do problema da membrana elástica. Os resultados de *deslocamentos* apresentados são bastante satisfatórios. Já em Silva (1988) é apresentada a formulação matemática deste novo método e resultados para membranas, hastes e vigas. Entretanto, em nenhum destes dois trabalhos aparecem os resultados de fluxo.

A principal vantagem apresentada nestes trabalhos é o fato de que o MLGFM é uma formulação integral que utiliza apenas projeções da Função de Green, aproximadas com o Método de Elementos Finitos, tornando desnecessário o seu conhecimento na forma explícita. Este fato elimina as singularidades do núcleo das equações integrais presentes na formulação.

Já na década de 90, de Barcellos & Barbieri (1991), mostraram que o MLGFM pode ser entendido como sendo uma extensão do Galerkin-BEM e aplicaram o método para a resolução de diversos problemas de potencial. Para potenciais singulares, de Barcellos & Barbieri (1991), o comportamento do fluxo perto da singularidade mostrou-se comparável aos resultados do BEM para singularidades do tipo 1/r com mesmo tipo de oscilação no elemento singular. Outra aplicação para os problemas de potencial foi para meios não homogêneos com variação escalonada e contínua das propriedades do meio, Barbieri & de Barcellos (1993), e neste trabalho ficou bastante claro o uso do MLGFM para situações onde não existe uma solução fundamental disponível na literatura.

Nas comparações de resultados com o Método de Elementos Finitos, em praticamente todos os trabalhos realizados com uso do MLGFM para análises lineares da mecânica do contínuo após Silva & Barcellos (1987) e Silva (1988), notou-se uma superioridade marcante para os resultados de fluxo pontual obtidos com o MLGFM.

Apesar da ótima convergência dos resultados de fluxo no contorno, ao longo destes anos dois outros fatos chamaram a atenção dos pesquisadores: o *excessivo* tempo de processamento gasto pelo MLGFM com relação ao FEM e que os resultados de potencial são *exatamente* os mesmos obtidos com o FEM quando a aproximação do vetor força utilizado no FEM é feita com valores nodais.

O *excessivo* tempo de processamento é proveniente da natureza das aproximações das projeções da Função de Green com o Método de Elementos Finitos. Algumas tentativas para redução do tempo de processamento do MLGFM foram feitas por Barbieri et al. (1994), Mendonça & de Barcellos (1995a) e Muñoz R. & Barbieri (1996) com resultados satisfatórios.

Com relação aos resultados de potencial *iguais*, este fato foi constatado por diversos autores como: Barbieri et al. (1994), Muñoz R. et al. (1994) e Muñoz R. & Barbieri (1996). Barcellos & Mendonça (1995) demonstraram matematicamente que este comportamento ocorre quando o vetor força do Método de Elementos Finitos é obtido através da interpolação da força de excitação com as mesmas funções de interpolação da variável em estudo. Para situações onde o vetor força do Método de Elementos Finitos é obtido com a projeção direta da força de excitação na base do subespaço de elementos finitos, os valores de potencial nodal obtidos com os dois métodos são diferentes.

Neste trabalho é apresentada uma revisão do MLGFM, na forma como tem sido utilizado até o momento, para problemas de potencial lineares. Os resultados numéricos são para mostrar a aplicação do método em problemas *anisotrópicos*, a razão de *tempo de processamento* entre o FEM e o MLGFM e a qualidade dos resultados de *fluxos* no contorno para estes métodos.

FORMALISMO DO MLGFM

A equação diferencial do problema de potencial linear *bem posto* definida no domínio Ω, Oden & Reddy (1976), pode ser escrita na seguinte forma:

$$A\,u = b \quad \text{em } \Omega, \tag{1}$$

onde A é o operador diferencial em estudo, u o potencial e b a excitação.

O problema adjunto correspondente é dado por:

$$A^* \mathbf{G}(P,Q) = \delta(P,Q) \quad \forall\, P,Q \in \Omega \tag{2}$$

onde A^* é o operador adjunto de A, $\delta(P,Q)$ é função Delta de Dirac e $\mathbf{G}(P,Q)$ é conhecida como solução fundamental.

A solução u(Q) do problema em estudo pode ser obtida com uso da *Forma de Green Generalizada* para o operador A e da Eq.(2), Barbieri (1992), e pode ser expressa como sendo:

$$u(Q) = \int_\Omega \mathbf{G}(P,Q)b(P)\,d\Omega_P - \int_\Gamma [N^* \mathbf{G}(p,Q)]u(p)\,d\Gamma_p + \int_\Gamma \mathbf{G}(p,Q)[Nu(p)]\,d\Gamma_p \tag{3}$$

onde N/N^* são os operadores de Neumman associados aos operadores A/A^*, respectivamente. Γ identifica o contorno, $p\in\Gamma$ e os índices nos diferenciais de integração indicam a origem do sistema de referência. Esta mesma equação também poderia ser obtida com uso do Método de Resíduos Ponderados, Barbieri (1992).

Neste ponto modifica-se a Eq.(3) introduzindo um novo operador sobre o contorno, N^+, e u(Q) passa a ser escrito como:

$$u(Q) = \int_\Omega \mathbf{G}(P,Q)b(P)\,d\Omega_P - \int_\Gamma [(N^* + N^+)\mathbf{G}(p,Q)]u(p)\,d\Gamma_p + \int_\Gamma \mathbf{G}(p,Q)[(N + N^+)u(p)]\,d\Gamma_p \tag{4}$$

O objetivo de adicionar este novo operador é prescrever condições de contorno homogêneas para a Eq.(2) da seguinte forma:

$$(N^* + N^+)\mathbf{G}(p,Q) = 0 \quad \forall\, p \in \Gamma \tag{5}$$

Assim procedendo e definindo $\mathbf{F}(p)=(N+N^+)u(p)$, u(Q) passa a ser obtido com:

$$u(Q) = \int_\Omega \mathbf{G}(P,Q)b(P)\,d\Omega_P + \int_\Gamma \mathbf{G}(p,Q)\mathbf{F}(p)\,d\Gamma_p \tag{6}$$

e tomando o traço de u(Q), Oden & Reddy (1976), tem-se:

$$u(q) = \int_\Omega \mathbf{G}(P,q)b(P)\,d\Omega_P + \int_\Gamma \mathbf{G}(p,q)\mathbf{F}(p)\,d\Gamma_p \tag{7}$$

que formam o sistema de equações integrais que definem completamente o problema e são a base para o desenvolvimento do MLGFM.

Note que, se N^+ é prescrito em regiões do contorno onde existem condições de contorno do tipo Dirichlet homogênea, a parcela $N^+u(p)$ não altera o valor de u(Q). Para situações onde isto não é possível especifica-se $N^+u(p) \ll Nu(p)$ para evitar pós-processamento dos valores finais.

Usualmente prescreve-se $N^+u(p)=ku(p)$ e para problemas lineares a única restrição para k é $k\neq 0$ desde que não comprometa o condicionamento numérico do problema discretizado.

IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA

Para implementação numérica do MLGFM são necessárias duas discretizações: a do domínio com elementos finitos e a do contorno com elementos de contorno. É importante salientar que a malha de elementos de contorno é tomada como sendo o traço da malha de elementos finitos e podendo conter nós duplos em pontos de interesse.

Designando por $[\Psi(\Omega)]$ o conjunto das funções de interpolação globais de domínio e por $[\Phi(\Gamma)]$ o conjunto de funções de interpolação globais de contorno, aplicando o método residual de Galerkin à Eq.(6) resulta:

$$\mathbf{A}\,\mathbf{u}^d = \mathbf{B}\,\mathbf{f} + \mathbf{C}\,\mathbf{b} \tag{8}$$

onde $\mathbf{u}^d$, $\mathbf{f}$ e $\mathbf{b}$ representam valores nodais de $u(\Omega)$, $\mathbf{F}(\Gamma)$ e $\mathbf{b}(\Omega)$, respectivamente. As matrizes $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ e $\mathbf{C}$ são dadas por:

$$\mathbf{A} = \int_\Omega [\Psi]^t[\Psi]\,d\Omega$$

$$\mathbf{B} = \int_\Gamma \mathbf{Gd}(p)[\Phi(p)]\,d\Gamma_p$$

$$\mathbf{C} = \int_\Omega \mathbf{Gd}(P)[\Psi(P)]\,d\Omega_P$$

com $$\mathbf{Gd}(p/P) = \int_\Omega \mathbf{G}(p/P,Q)[\Psi(Q)]\,d\Omega_Q$$

Analogamente, executando o mesmo procedimento para o contorno, Eq.(7), resulta:

$$\mathbf{D}\,\mathbf{u}^c = \mathbf{E}\,\mathbf{f} + \mathbf{F}\,\mathbf{b} \tag{9}$$

onde $\mathbf{u}^c$ representam valores nodais de $u(\Gamma)$ e as matrizes $\mathbf{D}$, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{F}$ são dadas por:

$$\mathbf{D} = \int_\Gamma [\Phi]^t[\Phi]\,d\Gamma$$

$$\mathbf{E} = \int_\Gamma \mathbf{Gc}(p)[\Phi(p)]\,d\Gamma_p$$

$$\mathbf{F} = \int_\Omega \mathbf{Gc}(P)[\Psi(P)]\,d\Omega_P$$

com $$\mathbf{Gc}(p/P) = \int_\Gamma \mathbf{G}(p/P,q)[\Phi(q)]\,d\Gamma_q$$

A Eq.(9) é similar ao sistema final de equações obtido com o Método de Elementos de Contorno e pode ser reescrita em função de valores prescritos (subscrito p) e desconhecidos (subscrito u) no contorno, resultando:

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{E}_u & \mathbf{D}_u \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \mathbf{f}_u \\ \mathbf{u}_u \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_p & \mathbf{E}_p \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \mathbf{u}_p \\ \mathbf{f}_u \end{Bmatrix} + \mathbf{F}\,\mathbf{b} \tag{10}$$

Após a resolução deste sistema de equações, os valores de domínio podem ser determinados pela Eq.(8) quando desejado.

Entretanto, para cálculo das matrizes **C**, **E** e **F** são necessários os valores de **Gd**(p/P) e **Gc**(p/P), pois a matriz $\mathbf{B}=\mathbf{F}^t$, Silva & Barcellos (1987). É interessante notar que **Gd**(p/P) representa projeções da Função de Green **G**(P,Q) sobre o subespaço gerado pela base de elementos finitos e **Gc**(p/P) representa projeções de **G**(P,Q) sobre o subespaço gerado pela base de elementos de contorno.

A determinação do valor destas projeções é um dos pontos cruciais da implementação numérica do MLGFM e seus valores discretizados são obtidos através do Método de Elementos Finitos com a minimização do seguinte funcional, Silva & Barcellos (1987):

$$J(a)=\frac{1}{2}\mathbf{B}_1(a,a)+\alpha\mathbf{B}_2(a,[\Psi])+\beta\mathbf{B}_3(a,[\Phi])+\frac{1}{2}\mathbf{B}_4(a,a) \tag{11}$$

onde (a,α,β) vale (**Gd**,-1,0) para a aproximação de **Gd**(p/P) e (**Gc**,0,-1) para a aproximação de **Gc**(p/P). $\mathbf{B}_1$ é a própria forma bilinear associada ao problema em estudo, $\mathbf{B}_2$,$\mathbf{B}_3$ e $\mathbf{B}_4$ também são formas bilineares definidas como sendo:

$$\mathbf{B}_2=\int_\Omega a(P)[\Psi(P)]d\Omega \quad ,$$

$$\mathbf{B}_3=\int_\Gamma a(p)[\Phi(p)]d\Gamma \quad , e$$

$$\mathbf{B}_4=\int_\Gamma [N^+a(p)]a(p)d\Gamma$$

Com estas aproximações determinam-se todas as matrizes necessárias para implementação do método.

EXEMPLOS NUMÉRICOS

Problema 1:

Resolver o problema de potencial expresso pela equação:

$$\Delta u=2n(2n-1)[x^{2n-2}(1-y^{2n})+y^{2n-2}(1-x^{2n})]$$

com n inteiro e definido sobre o domínio quadrado de lado 2 ilustrado na Fig.1. As condições de contorno são do tipo Dirichlet homogêneas e sua solução analítica é:

$$u(x,y)=(1-x^{2n})(1-y^{2n})$$

Devido à simetria do problema, apenas 1/4 do domínio é discretizado, com malhas homogêneas de elementos finitos e com a respectiva malha de elementos de contorno com nós duplos em pontos de descontinuidade da normal.

O projeto de malhas homogêneas e a escolha deste problema é proposital, pois com a simples variação do parâmetro n, o comportamento do fluxo ao longo do contorno apresenta comportamento bem distinto e com grandes gradientes.

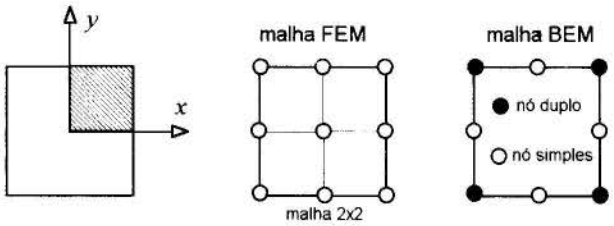


Fig.1-Domínio e Discretizaçoes de Elementos Finitos/Contorno.

A solução deste problema com o Método de Elementos Finitos foi utilizando valores nodais para cálculo do vetor força.

Caso1 . n=1

Nesta situação,

$$q(1,y)=\left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial n}\right|_{x=1}=-2+2y^2$$

apresenta um comportamento parabólico ao longo do lado x=1.

Para malha com apenas 1 *elemento linear* a resposta de potencial no nó central já é exata para os dois métodos, MLGFM e FEM. Entretanto, os resultados de $q(1,y)$ ao longo do lado x=1 são bastante diferentes e estão mostrados na Fig.2.

Nota-se que com apenas 1 elemento os resultados de $q(1,y)$ obtidos com o MLGFM são *exatos* nos nós. Como são prescritas condições de fluxo ao longo dos eixos de simetria, estas condições também são satisfeitas pelo MLGFM, como pode ser constatado pela Eq.(10). A mesma convergência de fluxo é verificada para as outras malhas, cujos valores nodais sempre estão sobre a curva analítica.

Já com uso do FEM, os resultados de $q(1,y)$ convergem lentamente para a solução exata ao longo de x=1, e mesmo com a malha de 10x10 elementos lineares o erro ainda pode ser considerado *grande*. Ainda assim, ao longo dos eixos de simetria as condições de Neumman só serão satisfeitas quando o tamanho dos elementos tender a zero. Portanto, sempre haverá um erro no fluxo ao longo destes eixos.

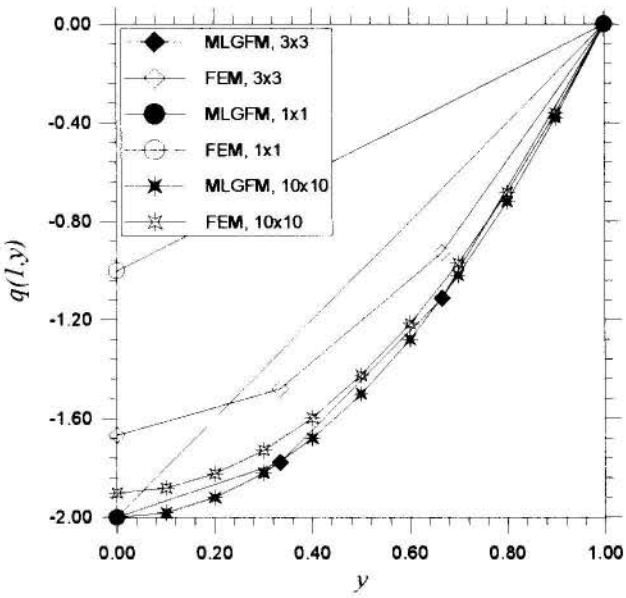


Fig.2- Comparação FEM × MLGFM de $q(1,y)$ para elementos lineares, n=1.

Caso2, n=3

Neste caso o gradiente de $q(1,y)$ é um pouco mais acentuado ao redor de y=1. Seu valor analítico é:

$$q(1,y) = \left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial n}\right|_{x=1} = -6 + 6y^6$$

A Fig.3 compara os resultados do MLGFM e do FEM para uma malha de 10x10 elementos *lineares*. Observa-se claramente que a solução via MLGFM está bastante próxima da solução analítica, mesmo com a presença de um gradiente mais acentuado em y=1. Já os resultados do FEM, embora qualitativamente semelhantes aos do MLGFM, apresentam valores quantitativos bem piores.

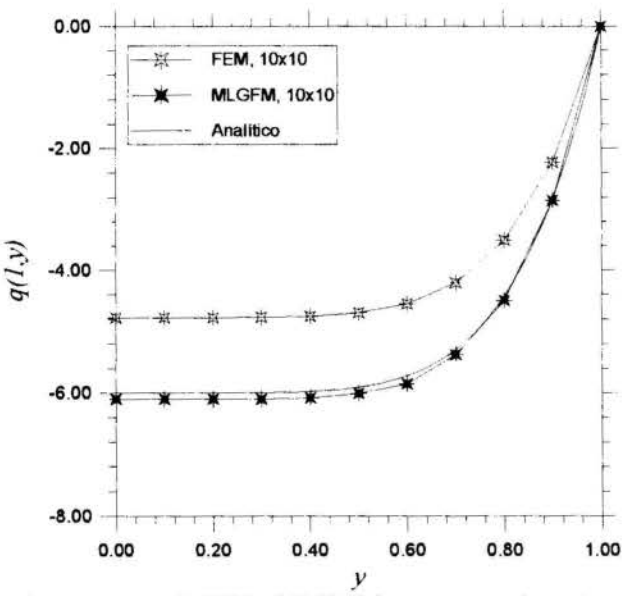


Fig.3- Comparação FEM x MLGFM de $q(1,y)$ para elementos lineares, n=3.

O mesmo problema foi resolvido com malhas homogêneas de elementos *quadráticos*. Os resultados de $q(1,y)$ estão plotados na Fig.4. Mesmo com este tipo de elemento, os resultados quantitativos do FEM ainda são bem piores que os resultados do MLGFM.

A fim de qualificar se o tempo de processamento do MLGFM é realmente *excessivo*, define-se a norma para o erro no fluxo como sendo:

$$Erro = \left| \left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial \mathbf{n}}\right|_{Exato} - \left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial \mathbf{n}}\right|_{Aprox.} \right|_{Max.}$$

e os valores obtidos com diversas malhas estão plotados na Fig.5.

Nesta figura nota-se que a *taxa de convergência* para o MLGFM *linear* é aproximadamente igual à do FEM *quadrático* e a taxa de convergência para o MLGFM *quadrático* é bastante superior à do FEM *quadrático*. Mesmo com malha de 8x8 FEM-elementos quadráticos, o resultado é inferior à malha 2x2 MLGFM-quadrático.

Através da Fig.4 nota-se que se a norma L_2 fosse escolhida para a medida deste erro os resultados do FEM também seriam muito piores que os do MLGFM.

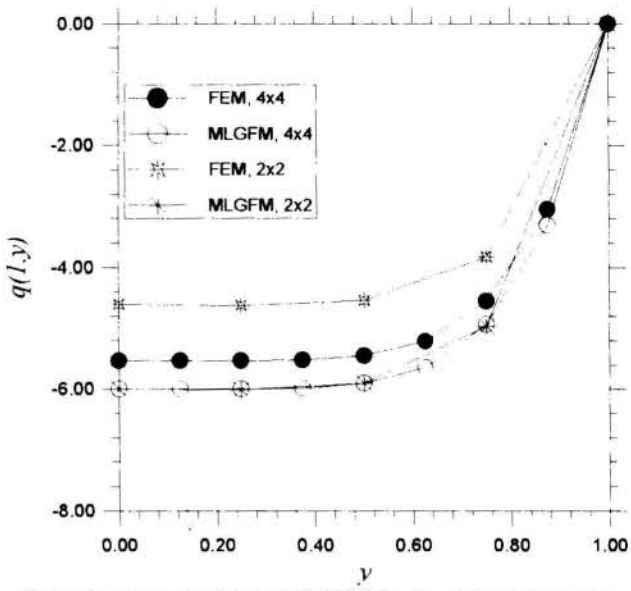


Fig.4- Comparação FEM x MLGFM de $q(1,y)$ para elementos *quadráticos*, n=3.

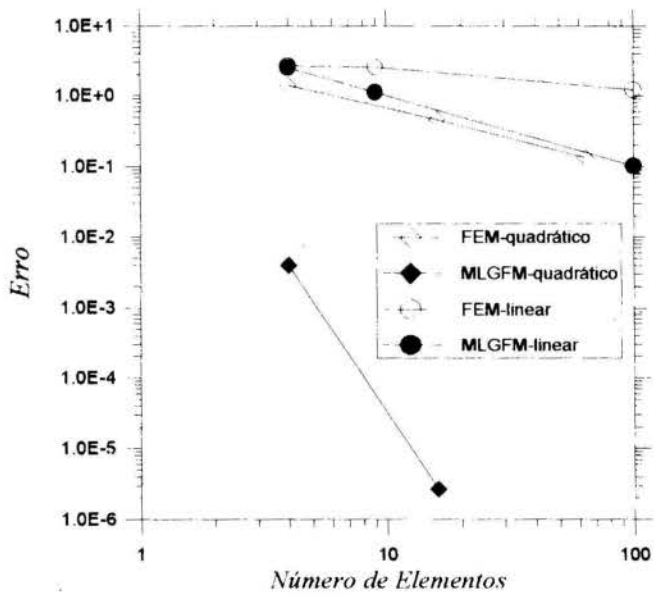


Fig.5-Convergência h para o Erro no Fluxo.

O último aspecto discutido para este exemplo é a análise de *tempo de processamento*. Na Fig.6, mostra-se o tempo de processamento para cada malha em função do erro no fluxo medido na norma citada anteriormente. Os tempos foram obtidos com microcomputador 486DX33Mhz com o aplicativo do FEM otimizado e com o aplicativo do MLGFM ainda em desenvolvimento. Foram utilizadas as mesmas subrotinas para cálculo dos elementos e resolução do sistema de equações.

Caso3,n=5

Neste caso, a expressão para $q(1,y)$ é:

$$q(1,y) = \left.\frac{\partial u(x,y)}{\partial n}\right|_{x=1} = -10 + 10y^{10}$$

e o seu comportamento apresenta um grandiente do potencial ainda maior.

O problema foi modelado com as mesmas malhas e elementos utilizados no caso anterior. Na Fig.7 mostra-se os resultados para $q(1,y)$ obtidos com malha de 4x4 elementos quadráticos. Nota-se que os resultados do MLGFM *coincidem* com a curva analítica. As mesmas características de convergência verificadas anteriormente são mantidas.

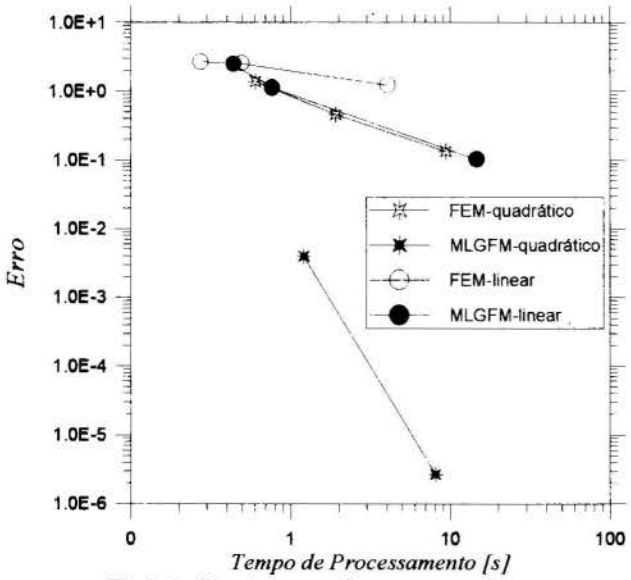


Fig.6-Análise de tempo de processamento.

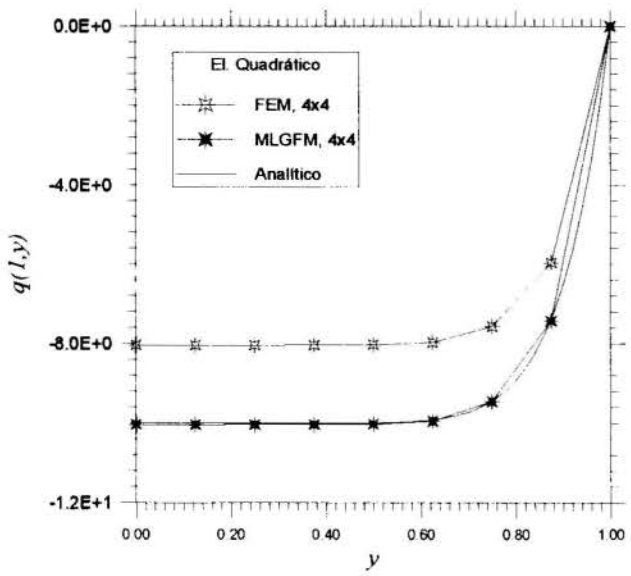


Fig.7-Comparação FEM x MLGFM de $q(1,y)$ para elementos *quadráticos*, n=5.

Problema 2:

Este problema é a primeira aplicação do MLGFM para potenciais anisotrópicos lineares e consiste em determinar a solução da equação:

$$k_{11}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2k_{12}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+k_{22}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0$$

com condições de contorno de Dirichlet devidamente prescritas em todo o contorno, como mostra a Fig.8. Nesta figura ilustra-se também a malha de elementos finitos utilizada para aproximar as projeções de domínio.

Este problema foi estudado com detalhes por Chang et al. (1973). Os resultados nodais para o potencial obtidos com o MLGFM são os mesmos obtidos com o Método de Elementos Finitos e estão de acordo com os do Método de Elementos de Contorno, Brebbia et al (1984).

Os resultados para o fluxo na superfície externa, $q(x,y)$,

$$q(x,y)=(k_{11}\frac{\partial u}{\partial x}+k_{12}\frac{\partial u}{\partial y})n_x+(k_{12}\frac{\partial u}{\partial x}+k_{22}\frac{\partial u}{\partial y})n_y$$

onde (n_x,n_y) são as componentes da normal ao contorno, são mostrados na Fig.9. Nesta figura são plotadas diversas curvas variando os parâmetros do meio e o resultado para meio isotrópico. A anisotropia é bastante evidente.

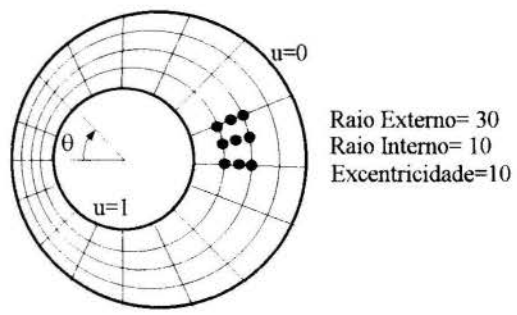


Fig.8-Domínio, Discretização e Condições de Contorno.

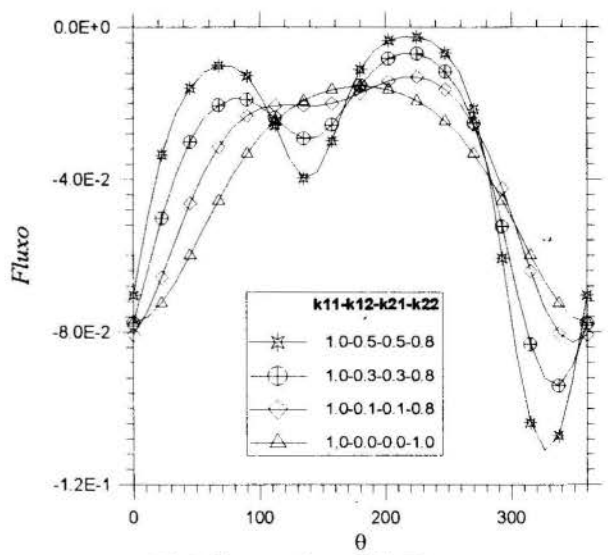


Fig.9-Fluxo na Superfície Externa.

CONCLUSÕES

Da maneira como tem sido utilizado até o momento, o MLGFM apresenta as seguintes características:

1-Os resultados de *fluxo* no contorno são bastante superiores aos obtidos com o FEM;

2-Comparando com o FEM o *tempo de processamento* é excessivamente alto para malhas iguais. Entretanto, as *taxas de*

convergência para fluxo pontual são bastante distintas. Se o interesse principal é a análise de fluxos o *excessivo* tempo de processamento pode tornar-se pequeno (às vezes muito pequeno); e

3-Comparando com o FEM, se o interesse principal na análise é determinar o potencial nodal, recomenda-se o uso do FEM.

O ponto crucial do MLGFM tem sido a determinação das projeções da Função de Green via Método dos Elementos Finitos. Se por um lado é ótimo, pois permite o uso da formulação integral sem o conhecimento de uma Solução Fundamental/Função de Green, por outro lado prejudica a performance do método com relação ao tempo de processamento.

O esforço atual esta sendo concentrado na redução do tempo de processamento para melhorar ainda mais a performance do método.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Barbieri, R. (1992)
Desenvolvimento e Aplicação do Método da Função de Green Local Modificado a Problemas do Contínuoa. Univ. Fed. Santa Catarina. Tese de Doutorado.

Barbieri, R. & Barcellos, C.S. de (1993)
Non-Homogeneous Field Potential Problems Solution by the Modified Local Green's Function Method (MLGFM). Eng. Analysis with Boundary Elements, Vol.11, pg.9-15.

Barbieri, R.; Machado, R.D.; Barcellos, C.S. & Filippin, C.G. (1994)
MLGFM: Uma formulação para Subregiões. Proc. XIV Cilamce, pg. 671-680.

Barcellos, C.S. de & Silva, L.H.M. (1987)
Elastic Membrane Solution by a Modified Local Green's Function Method. Proc. BETECH. Ed. C.A. Brebbia & W.S. Venturini. Computational Mechanics Publications. Southampton.

Barcellos, C.S. de & Mendonça, P.T.R. (1995). Comunicação pessoal no XVI Cilamce

Barcellos, C.S. de & Barbieri, R.(1991)
Solution of Singular Potential Problems by the Modified Local Green's Function Method (MLGFM). Proc. 13th BEM Conference. Ed. by C.A.Brebbia & C.S.Gipson, Computational Mechanics Publications, pp.851-862.

Brebbia, C.A.; Telles, J.C.F. & Wrobel,L.C. (1984)
Boundary Element Techniques. Theory and Applications in Engineering. Springer Verlag.

Burns, T.J. & Dorning, J.J.(1973)
A Partial Current Balance Method for Space and Energy-Dependent Reactor Calculations. Proc. Conf. Mathematical Models and Computations Techniques for Analysis of Nuclear Systems, Michigan, pg. 162-178.

Burns, T.J. & Dorning, J.J.(1974)
Approximate Generation of Coupling Parameters for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations. Trans. Am. Nuclear Soc., 19, pg.174-175.

Burns, T.J. & Dorning, J.J. (1975)
The Partial Current Balance Method: A New Computational Method for the Solution of Multidimension Neutron Diffusion Problems. Proc. Joint NEACRP/CSNI Specialists Meeting on new Developments in Three-Dimensional Neutron Kinetics and Benchmark Calculations, Lab. für Reaktorregelung und Anlagensicherung Garching (Munich), pg. 109-129.

Chang, Y.P.; Kang, C.S. & Chen, D.J. (1973)
The use of fundamental Green's Functions for the Solution of Heat Conduction in Anisotropic Media. Int. Journal Heat Mass Transfer 16, 1905-1918.

Horak,W.C. & Dorning, J.J.(1978a)
A Local Green's Function Method for Initial-Value Problems in Heat Conduction and Fluid Flow. Trans. Am. Nuclear Soc., 30, pg.215-216.

Lawrence,R.D. & Dorning, J.J.(1978)
Application of an Integral Coarse-Mesh Diffusion Method to Transients with Feedback. Trans. Am. Nuclear Soc., 30, pg.244-246.

Lawrence,R.D. & Dorning, J.J.(1978b)
A Nodal Green's Function Method for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations. Trans. Am. Nucl. Soc., 30, pg.248-249.

Mendonça, P.T.R. & Barcellos, C.S. de (1995)
Green's Element Method - Part I: Assembled Local Form. Proc. XVI Cilamce, pg. 21-30.

Muñoz R., P.A. & Barbieri, R. (1996)
A New Approach to the Discretization of the Modified Local Green's Function Method (MLGFM). Congreso Nacional de Ingenieria Mecánica (de Chile) - Valdivia. Submetido

Muñoz R., P.A. & Barcellos, C.S. (1994)
Análise Comparativa do Desempenho do Método da Função de Green Local Modificado frente ao Método dos Elementos Finitos para a Solução de Problemas de Flexão e Vibração Livre de Placas de Mindlin. Proc. XIV Cilamce, pg. 767-776.

Oden, J.T. & Reddy, J.N. (1976)
An Introduction to the Mathematical Theory of Finite Elements. John Wiley & Sons.

Silva, L.H.M. (1988)
Novas Formulações Integrais para Problemas da Mecânica. Univ. Fed. Santa Catarina. Tese de Doutorado.

SUMMARY

The Modified Local Green's Function Method (MLGFM) is an integral technique that has been used to solve several problems of continuum mechanics in the last decade. This method may be understood as an extension of the Galerkin Boundary Element Method and its main feature is to make use of the properties of a Green's Function associated to the problem without its explict knowledge. In this work, the formalism of the MLGFM is reviewed and the numerical examples presented explain points as flux convergence, processing time and the application of the method to anisotropic potential problems.

ABCM

UNA FORMULACIÓN DE ELEMENTOS DE CONTORNO PARA LA EVALUACIÓN DE VELOCIDADES DE TRANSFERENCIA DE CALOR ENTRE PARED-PARTÍCULA Y PARTÍCULA-PARTÍCULA EN LECHOS RELLENOS

Néstor J. Mariani, Germán D. Mazza, Osvaldo M. Martínez y Guillermo F. Barreto
Centro de Investigación y Desarrollo en Procesos Catalíticos
Departamento de Ingeniería Química - Fac. de Ingeniería
Universidad Nacional de La Plata
1900 - La Plata - Argentina

RESUMEN

Se presenta una fomulación basada en el Método de los Elementos de Contorno (MEC) para resolver un problema de transferencia de calor entre una partícula y una superficie de intercambio o entre un par de partículas .Esta simple configuración geométrica corresponde a una celda unitaria representando el comportamiento térmico tanto en las cercanías de la pared como en el seno en lechos fijos o fluidizados .Se discute como puede emplearse la formulación presentada para abordar importantes fenómenos como el comportamiento transiente acoplado a la conducción en partículas sólidas, sin la necesidad de emplear simplificaciones del tipo líneas de flujo paralelas. El MEC es formulado empleando un número variable de nodos definidos coincidentemente con los puntos de cuadratura, para calcular los coeficientes integrales de la matriz de influencia. Se muestra que esta opción es mas eficiente comparada con la formulación MEC estándar con elementos constantes o lineales.

1.- INTRODUCCIÓN

La importancia de la transferencia de calor en sistemas catalizados por sólidos u otras aplicaciones industriales, ha promovido numerosos trabajos de investigación experimentales y teóricos en las tres últimas décadas. Como recientes contribuciones al tema se puede citar el trabajo de Borman et al. (1992) para lechos fijos, mientras que avances en la interpretación de la evidencia experimental y formulación de modelos acerca de la transferencia de calor entre lechos fluidizados y superficies sumergidas pueden ser encontrados en los trabajos de Mazza et al. (1996a) y Lu et al. (1993).

La complejidad del problema es tal que hace imposible el análisis riguroso a través de principios fundamentales (por ejemplo a través de las expresiones microscópicas de conservación). Se han ensayado vías alternativas de aproximación definiendo parámetros efectivos, y tratando de evaluar efectos por separado para luego ensamblarlos y obtener una descripción global. Así, usualmente, la transferencia de calor por conducción ha sido tratada en forma separada de los efectos convectivos, con la expectativa que el proceso global pueda evaluarse por adición de ambas contribuciones. Esta aproximación es adecuada en el caso de gases o vapores fluyendo en lechos fijos o fluidizados. En realidad, debido a la baja conductividad térmica de los gases, la transferencia de calor entre dos partículas adyacentes se produce a través de una estrecha zona ubicada alrededor del punto de contacto entre las mismas. En esta zona la velocidad local de flujo de gas es baja, razón por la cual el mecanismo conductivo permanece inalterado. Por otra parte, la contribución de la convección es principalmente debida a la deflección de las líneas de flujo en las regiones mas abiertas del espacio interparticular. En conclusión, las contribuciones conductiva y convectiva involucran diferentes zonas del lecho.

Un descripción similar puede ser empleada para analizar cualitativamente la transferencia de calor entre una superficie de intercambio y las partículas adyacentes, aunque cuantitativamente existen diferencias a causa de la distinta configuración geométrica.

El objetivo de este trabajo es presentar y discutir una formulación numérica para evaluar la transferencia de calor por conducción entre una partícula esférica de relleno y una pared, asumiendo la condición de axi-simetría respecto de la dirección del gradiente global de temperatura. Este arreglo puede ser visto como una celda unitaria representando el comportamiento del lecho de partículas adyacente a la superficie de intercambio (para evaluar el coeficiente de transferencia en la pared), o puede ser empleado para calcular la velocidad de transferencia entre dos partículas ubicadas en el seno del lecho (para evaluar la conductividad térmica efectiva).

La principal característica de la formulación presentada es que el campo de temperatura en el interior de la partícula sólida es evaluado sin ninguna suposición tal como líneas de flujo paralelas o comportamiento isotérmico en los planos normales a la dirección del gradiente global de temperatura. Estas suposiciones han sido extensamente empleadas con el objetivo de obtener expresiones analíticas para correlacionar, por ejemplo la conductividad térmica efectiva (Tsotsas and Martin, 1987).

En las secciones siguientes, además de establecer y describir el procedimiento numérico, se discutirán dos aspectos. Por un lado se mostrará como pueden considerarse otra clase de efectos en la formulación, como los efectos transitorios. También se mostrará mediante ejemplos numéricos las diferencias registradas al asumir o no líneas de flujo paralelas en las partículas sólidas. Por otro lado, se analizará el procedimiento numérico específicamente. El campo de temperaturas en el interior de la partícula es descripto mediante una ecuación diferencial lineal del tipo de Helmholtz modificada, considerándose ésta adecuada para una gran variedad de casos prácticos. El Método de Elementos de Contorno (MEC) (Brebbia and Dominguez, 1992) es un método eficiente para este tipo de problemas, puesto que no se necesita el campo de temperaturas en el interior de la partícula para evaluar el flujo a través del contorno.

La formulación presentada aquí es un tipo particular de MEC que utiliza funciones interpolatorias de orden superior en los nodos correspondientes a la cuadratura de Gauss en cada elemento. Los coeficientes integrales de la matriz de influencia son calculados por cuadratura en los mismos nodos correspondientes a la función interpolatoria. La performance alcanzada con esta aproximación que en nuestro conocimiento no ha sido aún formulada será identificada como PC MEC. La misma es comparada con los MEC convencionales que emplean los llamados elementos constantes o lineales.

2.- FORMULACIÓN MEC

Se considera una partícula esférica de diámetro d_p y conductividad térmica uniforme λ_p, adyacente a una pared a temperatura T_w (Figura 1) con una fuente de generación de calor de la forma $(-\alpha T)$, con coeficiente α constante. Un fluido estanco con $\lambda_g = \lambda_p/\kappa$ rodea la partícula. Usando coordenadas esféricas (ρ, μ, φ), con $\mu = \cos\theta$, y adimensionalizando respecto del radio $d_p/2$, la ecuación de conservación en estado estacionario en el dominio Ω $(\rho<1)$ rodeado por el contorno Γ $(\rho=1, -1<\mu<1)$ resulta:

$$\nabla^2 T - a^2 T = 0 \qquad (1) \qquad\qquad a^2 = \alpha\, d_p^2 / (4\,\lambda_p) \qquad (2)$$

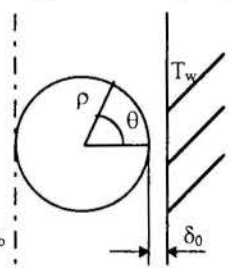


Figura 1. Esquema representativo de la partícula en estudio.

Asumiendo que la condición de borde es independiente de la posición angular φ alrededor del eje normal a la pared, la solución debe ser axi-simétrica. La formulación directa de elementos de contorno es expresada como:

$$c_i T_i + \int_{-1}^{1} (T q^{*i} - q T^{*i})\, d\mu = 0 \qquad (3)$$

En la Eq. (3), T^{*i} es la solución fundamental de $\nabla^2 T^{*i} - a^2 T^{*i} = \delta_i$, describiendo el campo en el dominio abierto generado por una carga de potencia unitaria concentrada en un anillo definido por $P_i \equiv (\rho_i, \mu_i)$, resultando

$$T^{*i} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{e^{-a r^i}}{r^i}\right) d\varphi \qquad (4)$$

donde:

$$r^i = \rho^2 + \rho_i^2 + 2\rho\rho_i \{\mu\,\mu_i + [(1-\mu_i^2)((1-\mu^2)]^{0.5} \cos\varphi\} \qquad (5)$$

En la presente notación el subíndice indica evaluación de la variable en ese punto y el superíndice representa funcionalidad con las coordenadas del punto P_i.

La constante c_i en la Eq. (3) depende de la posición de P_i, $c_i=1$ si $P_i \in \Omega$, $c_i=1/2$ si $P_i \in \Gamma$. La integral en la Eq. (3) está definida sobre Γ, T y T^{*i} son evaluados en $\rho=1$ y sólo dependen de μ. Los flujos sobre Γ son expresados por $q = (\partial T/\partial\rho)|_{\rho=1}$, y $q^{*i} = (\partial T^{*i}/\partial\rho)|_{\rho=1}$.

En el MEC se discretiza el contorno Γ en NE elementos Γ_e, e=1,..,NE, definidos en nuestro caso particular por segmentos $\mu_{e-1}<\mu<\mu_e$. Dentro de cada elemento se define un cierto número de nodos N, que por razones de simplicidad en el planteo supondremos el mismo valor en todos los elementos, y se proponen aproximaciones interpolatorias locales para T y q del tipo:

$$T = \sum_{k=1}^{N} \phi_k\, T_{k,e} \quad (7a); \qquad q = \sum_{k=1}^{N} \phi_k\, q_{k,e} \quad (7b)$$

donde $T_{k,e}$, $q_{k,e}$ son los valores nodales y ϕ_k las funciones interpolatorias, que, como es usual, se considerarán polinomios de Lagrange. Estos quedan definidos una vez que se especifica el número de nodos N y su ubicación. Supuesto que se mantiene equivalencia en todos los elementos, el conjunto de funciones ϕ_k es el mismo para todos los elementos si se expresan en términos de la coordenada local ξ,

$$\xi = \frac{2\mu - (\mu_e + \mu_{e-1})}{\mu_e - \mu_{e-1}} \qquad (-1 < \xi < 1) \qquad (8)$$

La equivalencia de los elementos implica igualdad de los puntos nodales internos $\{\xi_k\}$.

El número total de nodos NT puede expresarse en función de N y NE. Si se incluyen como nodos a los extremos de cada elemento, NT = NE (N-1) + 1 (en este caso $T_{N,e} = T_{1,e+1}$, $q_{N,e} = q_{1,e+1}$, e=1,..,NE-1). En caso contrario (sólo nodos internos) NT = NE N. Con el uso de las Eqs. (7), las integrales en la Eq. (3) se evalúan adicionando las contribuciones en cada elemento, resultando

$$c_i\, T_i + \sum_{e=1}^{NE}\sum_{k=1}^{N} H^i_{k,e}\, T_{k,e} - \sum_{e=1}^{NE}\sum_{k=1}^{N} G^i_{k,e}\, q_{k,e} = 0 \qquad (9)$$

$$H^i_{k,e} = \int_{\Gamma_e} \phi_k\, q^{*i}\, d\mu\,; \qquad H^i_{k,e} = \int_{\Gamma_e} \phi_{k,e}\, T^{*i}\, d\mu \qquad (10)$$

Para evaluar los valores nodales $T_{k,e}$, $q_{k,e}$ (2NT incógnitas), la Eq. (9) se plantea para cada función T^{*i} correspondiente a puntos P_i coincidentes con cada uno de los NT. Resulta un número de NT ecuaciones. Las remanentes NT ecuaciones necesarias para la evaluación de las 2NT incógnitas surgen de las condiciones de contorno, las que de manera general pueden expresarse,

$$\text{(sobre } \Gamma) \qquad \mathcal{B}(q, T) = 0 \qquad (11)$$

Las Eqs. (11), se aplican puntualmente para los mismos NT nodos. La opción más elemental para definir las funciones de aproximaciones, Eqs. (7), es considerar un solo nodo por elemento, lo cual involucra la constancia de q y T en cada elemento. Para esta opción, que denominaremos de "elementos constantes", resulta N=1, ϕ_1 =1, NT=NE. Otra posibilidad más conveniente es tomar los nodos coincidentes con los extremos de cada elemento. En cada uno de ellos la aproximación de T y q resulta lineal ("elementos lineales"), y se tendrá, N=2, NT=NE+1, $\phi_1 = (1-\xi)/2$, $\phi_2 = (1+\xi)/2$. Excepto para el elemento al cual pertenece el punto P_i, los coeficientes $H^i_{k,e}$ y $G^i_{k,e}$ en la Eq. (10) se calculan empleando una cuadratura Gauss-Legendre. Para ello se sugiere 4 puntos de cuadratura para "elementos constantes" y 6 en "elementos lineales" (Brebbia and Dominguez, 1992). Ello conduce a un número de evaluaciones funcionales de T^{*i} y q^{*i} del orden de 4 o 6 veces NT por cada P_i.

El tiempo de cómputo necesario para evaluar los $H^i_{k,e}$ y $G^i_{k,e}$ resulta, en general, importante y en particular para el caso aquí tratado, dado que la integral que define T^{*i}, Eq. (4), debe resolverse numéricamente, y otro tanto ocurre para q^{*i}. La alternativa propuesta en este trabajo es definir los nodos de interpolación coincidentes con los puntos de cuadratura. Por lo tanto, el conjunto $\{\xi_k\}$ corresponde a las raíces de polinomios de Legendre de grado N. De esta manera, para los elementos diferentes al que pertenece P_i, los coeficientes $H^i_{k,e}$ y $G^i_{k,e}$ resultan,

$$H^i_{k,e} = (\mu_e - \mu_{e-1})\, T^{*i}_k\, w_k \qquad (12a);$$

$$G^i_{k,e} = (\mu_e - \mu_{e-1})\, q^{*i}_k\, w_k \qquad (12b)$$

El resto de los términos de la cuadratura se eliminan puesto que el polinomio interpolatorio ϕ_k se anula en todos los nodos excepto en ξ_k, $\phi_k(\xi_k)=1$. El número de cálculos funcionales de T^{*i} y q^{*i} para calcular $H^i_{k,e}$ y $G^i_{k,e}$ resulta ahora NT, para cada P_i. Dado que para evaluar los coeficientes con precisión adecuada es necesario un número suficientemente elevado de puntos N, éste será un parámetro a seleccionar para la aplicación del método. Simultáneamente, el número de elementos podrá disminuir, frente a los requeridos para "elementos constantes" o "lineales". Esta formulación, en síntesis, emplea puntos nodales, puntos de carga P_i y puntos de cuadratura (PC) coincidentes. Será referida, entonces, como PC MEC.

Restaría definir como se procede para el cálculo de los coeficientes $H^i_{k,e}$ y $G^i_{k,e}$ para aquellos elementos que incluyen al punto P_i. La diferencia radica en que las funciones T^{*i} y q^{*i} tienen, ambas, una singularidad de tipo logarítmico en P_i. Tales coeficientes no pueden evaluarse eficientemente con una cuadratura Gauss ordinaria. Por razones de espacio se omitirá aquí la formulación empleada, la cual se encuentra desarrollada en Mariani et al. (1996). En esta misma referencia también se detalla como se procede en la práctica computacional para evaluar los valores numéricos de las funciones T^{*i} y q^{*i}.

Una vez que el conjunto de valores nodales sobre la superficie, $\{T_j\}$ y $\{q_j\}$, es calculado, se pueden determinar valores internos de T a partir de la Eq. (9), empleando la solución fundamental T^{*i} correspondiente al punto P_i (ρ_i, μ_i) donde se pretende realizar el cálculo. Sin embargo, para el problema en consideración, la magnitud que usualmente interesa es el coeficiente de transferencia entre la partícula y la pared, que como veremos no requiere de la evaluación de valores de temperatura internos. El coeficiente de transferencia es definido por, $h_p = Q_p \,/\, [(T_w - T_p)\ \pi d^2/4]$, donde Q_p es el calor intercambiado entre la partícula y la pared, expresado por

$$Q_p = 2\pi\lambda_p \left(\frac{d_p}{2}\right) \int_0^1 q\, d\mu \qquad (13)$$

y T_p es la temperatura media de la partícula definida por

$$T_p = \frac{3}{2} \int_0^1 \int_1^1 T \rho^2\, d\rho\, d\mu \qquad (14)$$

La definición de T_p involucra valores en todo el dominio Ω. Mariani et al. (1996) demuestran que una expresión alternativa que solo involucra cálculos en el contorno es:

$$T_p = \frac{3(1+a)\Lambda\, \overline{T}_s}{1 - a^2 \Lambda} \qquad (15)$$

con

$$\overline{T}_s = 2\int_{-1}^{1} T\big|_{\rho=1}\, d\mu \qquad A = \frac{e^{-a}\,[e^{a}(a-1) + e^{-a}(a+1)]}{2a^3}$$

Finalmente, el coeficiente de transferencia h_p es expresado en forma adimensional a través del número de Nusselt,

$$Nu_p = \frac{4\int_0^1 q\, d\mu}{(T_w - T_p)} \qquad (16)$$

3.- EJEMPLOS DE APLICACIÓN

La formulación expuesta en la sección precedente intenta evaluar la velocidad de transferencia de calor hacia la pared de un lecho fijo o fluidizado. También puede ser adaptada para estimar la conductividad efectiva cuando el arreglo de las partículas es tal que están alineadas en la dirección del gradiente global de temperatura.

Una suposición razonable para evaluar el número de Nusselt definido por la Eq. (16) cuando el fluido que rodea la partícula adyacente a la pared es un gas o un vapor ($\kappa>1$), es que las líneas de flujo en la fase fluida son normales a la pared. Asumiendo también que la temperatura es lo suficientemente baja como para despreciar el transporte radiante, las condiciones de contorno en la cara frontal de la partícula son:

$$\mu > 0,\ \ \rho = 1:\ q = \mu\,\frac{(T_w - T)}{(1 + L - \mu)};\ \ L = \frac{(\delta_0 + \delta_s)}{(d_p/2)} \qquad (17)$$

donde δ_0 representa la posible pequeña separación entre la partícula y la pared y δ_S es el camino libre medio modificado debido al llamado efecto Smoluchowski (Tsotsas and Martin, 1987). Este efecto tiene en cuenta el cambio en el mecanismo de transporte de calor entre el transporte por colisiones intermoleculares y, el transporte por colisiones entre molécula - superficie sólida cuando la distancia a la superficie sólida es del orden de camino libre medio en la fase gas.

Por último, la primer capa de partículas intercambia calor con la segunda capa de partículas. En un lecho de partículas ordenado al azar, los centros de estas partículas no están en el mismo plano geométrico, con lo cual cada partícula presenta una configuración local con respecto a sus vecinas, con, probablemente, mas de un punto de contacto. De lo anterior se desprende que coeficiente de transferencia con la pared será diferente al coeficiente de transferencia con la segunda capa de partículas. En Mariani et al. (1996) se discute que la siguiente condición de contorno resulta apropiada,

$$-1 < \mu < 0,\ \rho = 1,\ \ q = \frac{-\mu\,(T_b - T)}{(1 + L_b + \mu C)};\ C = \frac{B}{1 - (B-1)\mu} \qquad (18)$$

donde B es el factor de deformación (Tsotsas and Martin, 1987) empleado para cambiar la magnitud de coeficiente de transferencia con la segunda capa de partículas, T_b es la temperatura del plano hipotético indicado en la figura 1, y L_b tiene un rol equivalente a L. Si el factor de deformación es B=1, la Eq. (18) es equivalente a la Eq. (17) y físicamente corresponde al caso en el cual la primer y segunda capa de partículas tienen sus centros alineados perpendicularmente a la pared. Las Eqs. (17) y (18) completan la formulación básica para evaluar Nu_p.

Recientemente (Mazza et al., 1996b y Mazza and Barreto, 1996), este esquema fue empleado para analizar la transferencia de calor entre la fase densa de un lecho fluidizado por gas y una superficie sumergida. En este caso, un "paquete" de la fase densa se mantiene intercambiando calor con la superficie por un corto lapso, llamado tiempo de contacto (del orden de 1s, o menos). Seguidamente, es reemplazado por un "paquete" térmicamente fresco comenzando nuevamente el proceso de intercambio transiente. La renovación es causada por las burbujas que pasan en las cercanías de la superficie. La ecuación de conservación dentro de la partícula es para este caso $k_p \nabla^2 T - c_p \partial T/\partial t = 0$. Tomando la transformada de Laplace en la forma,

$$\mathcal{L}(T) = \tilde{T} = p \int_0^\infty e^{-tp}\, T\, dt$$

se obtiene para $\tilde{T}$ una expresión similar a la Eq. (1) con $a^2 = p\, c_p\, d_p^2/(4\lambda_p)$, suponiendo que la temperatura inicial de la partícula se normaliza a cero. La formulación MEC descripta en la sección precedente es empleada para evaluar $\underline{Nu}_p(p)$. Estos resultados pueden ser numéricamente invertidos para obtener la solución en el dominio temporal. Sin embargo, se describe en el trabajo de Mazza and Barreto (1996) que si el tiempo de contacto t_c es el mismo para todos los "paquetes", el valor promedio temporal del número de Nusselt Nu^{av} puede estimarse con suficiente precisión a partir de la relación $p = 1 / (0{,}7t_c)$ es decir $Nu^{av} \cong \underline{Nu}\,(0{,}7t_c)$.

Hay muchos tipos de modelos para evaluar la conductividad térmica efectiva en sistemas dispersos sin flujo de fluidos (Tsotsas and Martin, 1987). En muchos de ellos se utiliza una celda unitaria como representativa de todo el lecho. Con el objeto de obtener una expresión explícita, se hacen suposiciones adicionales para el mecanismo dentro de la celda, por ejemplo líneas de flujo paralelas (en ambas fase, dispersa y continua) o isotermas paralelas (en los planos normales al gradiente de temperatura). Se introducen algunos parámetros ajustables en las expresiones básicas para la celda unitaria, fijados finalmente por consideraciones geométricas o ajuste experimental de resultados. Dos expresiones muy populares en el campo de los lechos fijos y fluidizados son las de Kunii and Smith y Bauer and Schlunder ambas basadas en la suposición de líneas de flujo paralelas. Las mismas fueron encontradas como las correlaciones mas confiables en la revisión de Lemcoff et al. (1990).

La celda base empleada en este modelo contiene dos partículas hemisféricas adyacentes con sus bases a temperatura uniforme T_0 y T_1. Para los cálculos se considera sólo una hemiesfera intercambiando calor con una pared imaginaria a una temperatura $(T_0 + T_1)/2$. La formulación MEC empleada para una partícula sobre la pared (Figura 1), puede ser fácilmente adaptada para esta situación. Es necesario considerar las relaciones entre los campos delante y detrás de la partícula, $q(-\mu) = q(\mu)$ y $T(-\mu) = -T(\mu) + (T_0 + T_1)$.

Usando una discretización simétrica con respecto a $\mu=0$, sólo los campos en $\mu>0$ son necesarios para resolver el problema. Además se emplea la condición de contorno Eq. (17) con L/2 reemplazando a L.

La conductividad efectiva basada en el área proyectada de la partícula sólida es evaluada como $\kappa_{ef} = \lambda_{ef,p}/\lambda_g = Nu_p/2$, donde Nu_p es obtenido de la Eq. (16).

Los resultados de los cálculos utilizando MEC son comparados en la figura 2 con aquellos en los cuales se asume líneas de flujo paralelas en el sólido y con resultados numéricos previos en los que se utilizó una técnica de relajación (Wakao and Vortmeyer, 1971). El rango de valores de κ analizados es $1 < \kappa < 10^4$. Este rango cubre prácticamente todos los materiales sólidos (desde aislantes hasta metales). Se puede apreciar que los valores de κ_{ef} comienzan a diferir significativamente de aquellos calculados con líneas de flujo paralelas (ambos con L=0) para valores de κ mayores que 100.

A $\kappa=10^4$, el valor dado por MEC es 70% mayor que para líneas de flujo paralelas. La razón para esta diferencia es que un sólido con alta conductividad térmica puede fácilmente concentrar las líneas de flujo alrededor del punto de contacto. Esta situación se refleja en el número de cálculos que se necesitan para discretizar esta zona. Para alcanzar una precisión en el rango de 1 a 0.1% a $\kappa=10^4$, es necesario emplear NE=5 y N=10 para los cálculos con PC MEC (NT=50). Los elementos fueron definidos por los puntos μ_e=(0, .95, .9995, .99999, .9999999, 1). El número NT decrece continuamente con κ: para κ=2, alcanzan 4 nodos en un único elemento para alcanzar una precisión de 0.5%.

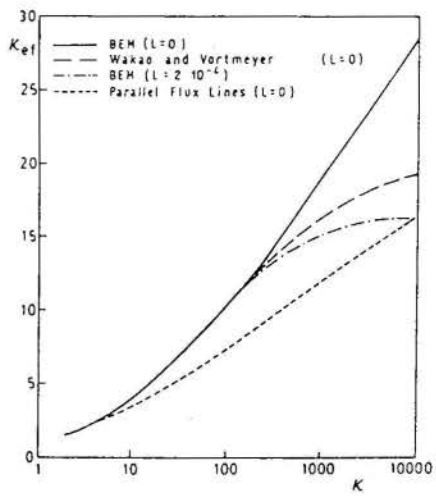


Figura 2. Comparación entre los valores predichos para κ_{ef} por los distintos modelos.

La pregunta de cómo una expresión basada en una celda unitaria asumiendo líneas de flujo paralelas puede ser usada para representar la conductividad efectiva (para partículas con $\kappa>100$) en lechos rellenos reales puede ser respondida teniendo en cuenta el efecto Smolochowski. Para aire a temperatura ambiente y presión atmosférica, $\delta_S = 0.25\mu m$. Para una partícula de 2.5mm (tamaño típico en un reactor catalítico tubular), resulta $L/2 = 1\ 10^{-4}$. Con este valor, los cálculos con PC MEC también son mostrados en la figura 2. Puede verse que las diferencias con respecto a asumir líneas de flujo paralelas son ahora moderadas y sólo se manifiestan en el rango intermedio de κ. Esto justifica, por ejemplo, el hecho de que la correlación de Kunii y Smith, que no incluye el efecto Smolochowski, sea una herramienta útil para predecir conductividades efectivas.

Por otro lado, el efecto Smolochowski a presión atmosférica no afecta apreciablemente los resultados con la suposición de líneas de flujo paralelas. Con $L/2 = 10^{-4}$ la diferencia máxima (a $\kappa=10^4$) es 8%.

En conclusión, el efecto Smolochowski aparece a presión atmosférica como mas significativo de lo que hasta ahora se había reconocido.

Con respecto a los resultados del trabajo de Wakao y Vortmeyer (1971) que se aprecian en la figura 2, las diferencias con los cálculos del MEC son debidas, probablemente, a la división uniforme de la grilla para diferencias finitas empleada por los autores, la cual no es suficiente para realizar los cálculos a grandes valores de κ.

4.- PERFORMANCE DE LA FORMULACIÓN PC MEC

La eficiencia de la formulación propuesta, PC MEC, será comparada con los resultados obtenidos utilizando los métodos estándar de elementos constantes y lineales. Para las evaluaciones se adoptará el número de Nusselt como magnitud relevante. En todos los cálculos, el contorno del dominio $-1<\mu<1$ fue discretizado simétricamente respecto del punto $\mu=0$.

El número de elementos NE se refiere a la hemiesfera; a su vez, los puntos que definen los elementos son indicados entre paréntesis. Por ejemplo NE=2 (0.9) indica cuatro elementos en total, definidos por (-1, -0.9, 0, 0.9, 1). N es el número de nodos en cada elemento para la formulación PC MEC. Para elementos constantes o lineales, a menos que se especifique otra cosa, NE representa el número de elementos no equidistantes, cada uno subdividido en N sub-elementos igualmente espaciados.

Para el caso estacionario sin término de fuente (a=0), B=1 (parámetro en la condición de contorno Eq. 18) y $\kappa=1$, la temperatura y el flujo en la superficie de la partícula esférica son funciones lineales de μ. Los resultados (con $L=L_b=0$ en las Eqs. 17 y 18) para PC MEC y para elementos constantes están dados en la tabla 1 para NE=1 y diferentes valores de N. Los resultados para elementos lineales no están dados, porque se obtiene el valor exacto, $Nu_p=2$, con N=1.

Tabla 1. Resultados para $\kappa=1$, $\delta_0=0$ y NE=1

N	ε %	
	Elementos Constantes	PC MEC
2	3.5	-0.55
4	1.1	-0.25
6	0.5	-0.10
8	0.3	-0.06
12	0.15	-0.022

El error relativo ε% asociado con PC MEC es enteramente debido a la aproximación hecha al calcular las integrales para los coeficientes $H^1_{k,e}$ y $G^1_{k,e}$, dado que las funciones interpolatorias ϕ_k de orden mayor o igual que uno son capaces de describir exactamente el perfil lineal. Si se requiere una precisión en el rango de 0.1 - 1 %, un número de nodos de 4 o 6 por elemento es suficiente. Por otra parte, los errores para los elementos constantes son siempre mayores que para la formulación PC MEC. El error en los elementos constantes es debido únicamente a la naturaleza de las funciones de aproximación.

El método PC MEC es menos eficiente que el método de los elementos lineales en el caso trivial de los perfiles lineales, dado que la mayor cantidad de nodos no es empleada en alcanzar una mejor descripción de T y q en el contorno. En cambio, si los perfiles exactos de T o q son tales que requieren aproximaciones de orden superior, el valor N necesario para evaluar correctamente los coeficientes $H^1_{k,e}$ y $G^1_{k,e}$ puede ser simultáneamente apropiado para aproximar T y q. Puede esperarse que el método PC MEC se comporte eficientemente para casos no triviales.

Para el problema considerado aquí, una precisión en el rango de 0.1 a 1 % en la estimación de Nu_p será satisfactoria para la mayoría de las aplicaciones. En los párrafos siguientes, se analizarán los resultados numéricos para casos no triviales en los cuales $\kappa>1$.

Los errores para los métodos PC MEC y para los elementos constantes y lineales son comparados en la figura 3 para valores moderados de κ. El valor exacto de Nu_p fue calculado en todos los casos utilizando altos valores de NE y/o de N. Los valores de los parámetros para la condición de contorno en la cara posterior, Eq. 18, fueron siempre tomados B=1 y $L_b=10^{-4}$.

Para un valor de $\kappa=1.5$, los perfiles de T y de q no se apartan demasiado de la linealidad. Esto puede ser observado en la figura 3, dado que los errores para los elementos lineales y para el PC MEC son comparables. En cambio, para $\kappa=5$, hay una clara ventaja si se utiliza este última formulación.

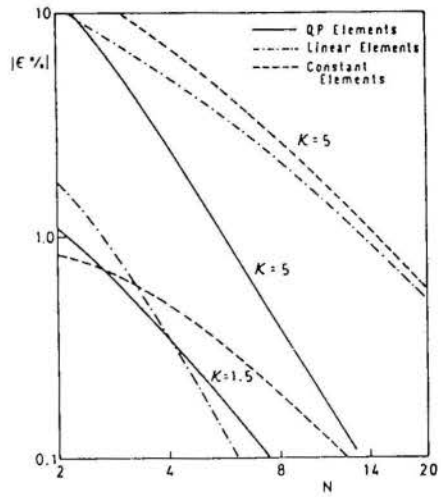


Figura 3. Comparación de performance los distintos métodos a valores moderados de κ.

El comportamiento a valores altos de κ se muestra en la figura 4. La convergencia es mas rápida para la formulación PC MEC, y como consecuencia de esto, para alcanzar un error en el rango entre 0.1- 1%, se requiere una menor cantidad de nodos que para los elementos constantes y lineales.

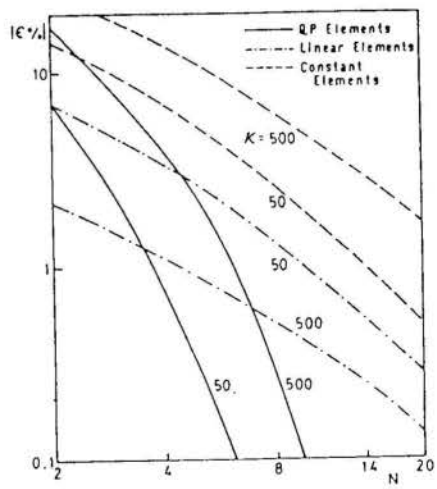


Figura 4. Comparación de performance los distintos métodos a valores altos de κ.

El valor de $L\neq0$ empleado en la figura 4 permite que la temperatura en la superficie de la esfera se uniformice para altos valores de κ, aún alrededor del punto $\mu=1$. A diferencia del caso en el que L=0, la velocidad de transferencia de calor se aproxima a un valor máximo posible, el cual depende únicamente del valor de L. Esta situación hace que el error comience a revertir su tendencia a partir de un cierto valor de κ. Este efecto se presenta en un valor cercano a $\kappa=100$ para los elementos lineales. Para la formulación PC MEC la transición

no mostrada en la figura 3) ocurre en valores κ=500-1000, y se requieren valores aún mayores para los elementos constantes.

La tendencia mostrada en las figuras 3 y 4 es seguida por otras combinaciones de parámetros no incluidas aquí por razones de espacio (comparaciones con $a \neq 0$ y variaciones en L pueden encontrarse en Mariani et al. (1996)).

Los resultados pueden ser resumidos de la siguiente forma: los elementos PC muestran, en general, la mejor performance, evaluada por el número total de nodos. Conforme el perfil de temperatura se suaviza, los elementos PC y lineales muestran una performance comparable. Los elementos constantes producen en todos casos errores mayores.

Se ensayaron distintas formas de definir el tamaño de los elementos para la formulación de elementos constantes. Dado que el tamaño de los elementos debe disminuir conforme $\mu \rightarrow \pm 1$, los puntos que definen los NT elementos fueron obtenidos por la siguiente ecuación $\mu_e = (e/NT)^{\nu}$, con $\nu < 1$, para $\mu_e > 0$ y simétricamente para $\mu_e < 0$. El exponente ν fue optimizado buscando el mínimo error. Esto fue llevado a cabo para las condiciones ensayadas en la figura 3, pero los errores resultantes con el valor óptimo de ν no difirieron significativamente de los reportados en la figura 3.

En lo que respecta al tiempo de cómputo demandado por los métodos estudiados aquí, los elementos constantes y lineales necesitan en todos los casos mucho mas tiempo que los elementos PC para el mismo valor del número total de nodos. Por ejemplo, para NE=3, N=10 (y seis puntos de cuadratura para elementos constantes y lineales), los elementos constantes demandaron 4.4 veces mas tiempo que los elementos PC. Los elementos lineales emplearon tiempos de cálculo ligeramente mayores que los elementos constantes.

Es importante notar que la formulación PC MEC puede generalizarse para cualquier tipo de problemas axi-simétricos o bidimensionales, y puede implementarse computacionalmente de una manera muy simple. Se han tratado otros problemas potenciales utilizando la formulación PC MEC, obteniéndose resultados satisfactorios. Sin embargo, su eficiencia aún no ha sido demostrada sistemáticamente para un amplio espectro de problemas.

CONCLUSIONES

La formulación presentada en este trabajo permite evaluar la contribución del mecanismo conductivo en escala de una partícula en un lecho fijo o fluidizado, sea para evaluar conductividades efectivas o coeficientes sobre la pared.

Para el caso de dos partículas en contacto directo, los resultados numéricos presentados aquí indican que la velocidad de transferencia de calor es mayor que la obtenida empleando la simplificación de líneas de flujo paralelas. De cualquier forma, si el efecto Smoluchowski es tenido en cuenta, la velocidad de transferencia estimada desciende significativamente. Se concluye de esta manera que el efecto Smoluchowski presenta, aparentemente, una influencia mas profunda que la hasta ahora reconocida a presión atmosférica y tamaños de partícula relativamente grandes.

El tipo particular de MEC formulado en este trabajo emplea un número variable de nodos definidos en los mismos puntos de cuadratura en los cuales se calculan los coeficientes de la matriz de influencia. Se muestra que esta es una elección mas eficiente comparada con la formulación MEC estándar empleando elementos constantes o lineales. Por último, se obtiene una reducción del tiempo de cómputo del orden de cinco veces para una precisión en el rango de 0.1 - 1 %.

REFERENCIAS

Borman P. C., Borkink J. G. H. and Westerterp K. R., 1992, "Heat Transport in a Wall Heated Tubular Packed Bed Reactor at Elevated Pressures and Temperatures", *Chem. Eng. Comm.*, vol. 114, pp. 17-47.

Mazza G. D., Mariani N. J. and Barreto G. F., 1996a, "Evaluation of Overall Heat Transfer Rates between Bubbling Fluidized Beds and Immersed Surface", submitted to *Chem. Eng. Comm.*.

Mazza G. D., Bressa S. P. and Barreto G. F., 1996b, "On the Validity of the Addition of Independent Contribution for Evaluating Heat Transfer Rates in Gas Fluidized Beds", *Powder Technol.*, in press.

Lu J. D., Flamant G. and Snabre P., 1993, "Towards a Generalized Model for Vertical Wall to Gas-Solid Fluidized Beds Heat Transfer. I. Particle Convection and Gas Convection", *Chem. Eng. Sci.*, vol. 48, pp. 2479-2492.

Tsotsas E. and Martin H., 1987, "Thermal Conductivity of Packed Beds: A Review", *Chem. Eng. Process.*, vol. 22, pp. 19-37.

Brebbia C. A. and Dominguez J., 1992, "Boundary Elements an Introductory Course", 2nd. ed., Computational Mechanics Publications, Southampton.

Mazza G. D. and Barreto G. F., 1996, "Evaluation of Conductive Mechanisms between an Immersed Surface and the Adjacent Layer of Particles in Fluidized Beds", submitted to *Chem. Eng. Comm.*.

Wakao N. and Vortmeyer D., "Pressure Dependency of Effective Thermal Conductivity of Packed Beds", *Chem. Eng. Sci.*, vol. 26, pp. 1753-1765, 1971.

Lemcoff N. O., Pereira Duarte S. I. and Martinez O. M., 1990, "Heat Transfer in Packed Beds", *Reviews in Chem. Eng.*, vol. 6, pp. 229-292.

Mariani N. J., Bressa S. P., Mazza G. D., Martinez O. M. and Barreto G. F., "A BEM Formulation for Evaluating Conductive Heat Transfer Rates in Particulate Systems", submitted to *Numerical Heat Transfer*.

SUMMARY

A formulation based on the Boundary Element Method (BEM) to solve the conductive heat transfer problem between a particle and an adjacent heat exchange surface or between two particles is presented. This simple geometrical configuration corresponds to a unit cell expected to represent the thermal behaviour near the walls in a fixed or fluidized bed of particles or in the bulk of the bed, from which conductive heat transfer coefficients or effective thermal conductivities can be assessed. It is discussed how the formulation can be employed to evaluate some important phenomena such as transient effects coupled to heat conduction in the solid particles, without simplifying assumptions such as parallel flux lines. This BEM, which is first formulated, employs a variable number of nodes defined by the same local quadrature points on which the integral coefficients of the influence matrix are evaluated. It is shown that this is a very efficient choice as compared to standard BEM formulation with constant or linear elements.

TRATAMIENTO DE PROBLEMAS TERMOELASTICOS MEDIANTE UNA NUEVA FORMULACION DEL METODO DE LOS ELEMENTOS DE CONTORNO

Gemma Rodriguez*, Berardi Sensale*, Guillermo J. Creus**

* Facultad de Ingeniería
Universidad de la Republica
Montevideo - Uruguay

** CEMACOM
Universidade Federal de Rio Grande do Sul
Porto Alegre - Brasil

RESUMEN

Una formulación alternativa para el uso del DRM en BE es propuesta para problemas termoelásticos desacoplados. En esta formulación, la distribución de temperatura obtenida por un análisis de transferencia de calor en BEM es directamente usada para resolver el problema elástico sin necesidad de diferenciaciones especiales como en otras formulaciones del DRM. Como funciones de aproximación del DRM son usadas las "Augmented Thin Plate Spline" (ATPS) y las "radial basis funtions"(RBF). Se muestra que la aproximación ATPS aumenta la exactitud con poco esfuerzo extra de implementación.

INTRODUCCIÓN

La principal ventaja del BEM es su característica de trabajar "solamente en el contorno", es decir su capacidad de resolver completamente el problema propuesto utilizando exclusivamente valores en el contorno del cuerpo.

Una restricción inicial del BEM es que, al trabajar con densidad de fuerzas de masa, aparecen integrales de dominio como términos "no homogéneos", las cuales hacen que el método pierda la atracción de su carácter "solamente en el contorno".

Se han desarrollado varias aproximaciones que dan solución a este problema. Se destaca por su generalidad, que lo hace aplicable a una gran variedad de problemas de ingeniería, el Método de Reciprocidad Dual (DRM). La idea básica de este metodo desarrollado por Nardini y Brebbia (1982), es emplear la solución fundamental correspondiente a una ecuación simplificada y tratar los restantes términos, así como otros términos "no homogéneos" mediante un procedimiento que considera un desarrollo en serie con funciones de aproximación globales. Un tratamiento completo puede encontrarse en Partridge (1992). Numerosos investigadores aplicaron el BEM al análisis de problemas de tensiones térmicas: Danson (1981) utilizó el BEM en forma conjunta con el vector de Garlekin con el fin de transformar las integrales de dominio debidas a la acción de las fuerzas de masa en integrales de contorno: Neves (1992) resuelve el mismo problema empleando el Método de Reciprocidad Multiple.

La formulacion del DRM para termoelasticidad aqui desarrollada, presenta la ventaja frente a otras formulaciones (Partridge, 1992) de trabajar directamente con la distribucion de temperaturas obtenida por medio de la transferencia de calor sin necesidad de calcular el gradiente de temperatura. Como en este trabajo nos ocuparemos del estado permanente de temperaturas, los problemas de transferencia de calor y termoelasticidad se desacoplan. Para resolver cada uno de ellos, se aplica el Método de Reciprocidad Dual, con funciones de interpolacion expresadas en funcion de "Augmented Thin Plate Splines" (ATPS) las cuales son combinación lineal de "Radial Basis Functions" (RBF) y funciones lineales (Golberg y Chen, 1994). La utilización de las ATPS como funciones de interpolación presenta una notable mejoria en la exactitud de los resultados en comparación con otras funciones de interpolación como las RBF (Sensale, 1994).

ECUACIONES DE LA TERMOELASTICIDAD LINEAL.

Las ecuaciones que gobiernan la termoelasticidad lineal en estado permanente para materiales isótropos, son:

$$E = (\nabla u + \nabla^t u) / 2$$

$$\nabla . T + b = 0 \qquad (1)$$

$$T = 2\mu E + \lambda(\mathrm{tr}E)I + m(\theta - \theta_0)I$$

$$-\nabla . q + \rho = 0 \qquad (2)$$

$$q = -k\nabla\theta$$

Donde E y T son los tensores correspondientes a: pequeñas deformaciones y tensiones: u, b y q son los vectores de desplazamientos, densidad de fuerzas de masa y flujo de calor: θ, θ_0, ρ, k y m son la temperatura, la temperatura de referencia, el calor generado por unidad de volumen, el coeficiente de conductibilidad y el módulo tensión-temperatura, respectivamente. Definiéndose el coeficiente de expansión térmica $\alpha = -m/(3\lambda + 2\mu)$, siendo λ y μ las constantes de Lamé.

Cabe observar que el sistema anterior es desacoplado, en el sentido que el campo de temperaturas θ puede ser determinado con las dos últimas ecuaciones (2):

$$\nabla^2\theta = -\rho/k \qquad (3)$$

y luego ser sustituido en la ultima ecuacion (1).

Operando con las ecuaciones (1) se obtiene la ecuación generalizada de Navier:

$$u\,\nabla u + (\lambda + \mu)\,\nabla(\nabla . u) + m\nabla(\theta - \theta_0) + b = 0 \qquad (4)$$

ECUACION INTEGRAL DE CONTORNO

La ecuación integral de contorno del problema de transferencia de calor en estado permanente es dada por (Partridge, 1992):

$$c_p\theta(P) = \int_\Gamma \theta^* q \, d\Gamma - \int_\Gamma q^* \theta \, d\Gamma + 1/k \int_\Omega \theta^* \rho \, d\Omega \qquad (5)$$

donde

$$\theta^* = -(2\pi)^{-1} \ln r \qquad (6)$$

$$q^* = r_{,i} \, n_i \, k / (2\pi); \text{ siendo } r_{,i} = \partial r / \partial x_i \qquad (7)$$

La ecuación integral de contorno en termoelasticidad es (Partridge, 1992):

$$c_p u(P) = \int_\Gamma u^* t \, d\Gamma - \int_\Gamma t^* u \, d\Gamma + \int_\Omega u^* b \, d\Omega - \int_\Omega m\theta \nabla . u^* \, d\Omega \qquad (8)$$

donde, para estado plano, las matrices asociadas a los tensores u^* y t^* son:

$$u^*_{ik} = [(3-4\nu) \ln(1/r) \, \delta_{ik} + r_{,i} \, r_{,k}] / [8\pi\mu(1-\nu)] \qquad (9)$$

con $r = |X - P|$

$$t^*_{ik} = - \{[1-2\nu)\delta_{ik} + 2 \, r_{,i} \, r_{,k}] \partial r / \partial n + (1-2\nu)(n_i \, r_{,k} - n_k \, r_{,i})\} / [4\pi (1-\nu) \, r] \qquad (10)$$

METODO DE RECIPROCIDAD DUAL

El Método de Reciprocidad Dual (DRM) para el problema de transferencia de calor con "Augmented Thin Plate Splines" (ATPS) es desarrollada por Karur y Ramachadran (1995). Aquí será presentada una formulación alternativa para el DRM en termoelasticidad..

En la hipótesis de ausencia de fuerzas de masa, la ecuación de Navier (4) y la ecuación integral de contorno (8) se expresan para $\theta_0 = 0$:

$$\mu \nabla u + (\lambda+\mu)\nabla(\nabla . u) + m\nabla\theta = 0 \qquad (11)$$

$$c_p u(P) = \int_\Gamma u^* t \, d\Gamma - \int_\Gamma t^* u \, d\Gamma - \int_\Omega m\theta \nabla . u^* \, d\Omega \qquad (12)$$

El Método de Reciprocidad Dual es utilizado para transformar la última integral de la ecuación (12) en una integral de contorno. Para ello se aproxima el campo de temperatura $\theta(X)$ mediante:

$$\theta(X) = \sum_{k=1}^{Np} \hat{f}^{(k)}(X) \, \alpha^{(k)} \qquad (13)$$

donde $f^{(k)}$ son funciones de interpolación y $\alpha^{(k)}$ sus coeficientes respectivos.

Si sobre el cuerpo Ω actúa un campo de temperatura $\hat{f}^{(k)}(X)$, entonces la solución en desplazamientos $\hat{u}^{(k)}$ verificará las ecuaciones

$$\mu \nabla \hat{u}^{(k)} + (\lambda+\mu)\nabla(\nabla . \hat{u}^{(k)}) + m\nabla\hat{f}^{(k)}(x) = 0 \qquad (14)$$

$$c_p \hat{u}^{(k)}(P) = \int_\Gamma u^* \hat{t}^{(k)} d\Gamma - \int_\Gamma t^* \hat{u}^{(k)} d\Gamma - \int_\Omega \hat{f}^{(k)} m\nabla . u^* d\Omega \qquad (15)$$

El último término de (12) se puede escribir a partir de las ecuaciones (13) y (15)

$$-\int_\Omega \theta m \nabla . u^* d\Omega = -\sum_{k=1}^{Np} \int_\Omega \hat{f}^{(k)} m \nabla . u^* d\Omega \, \alpha^{(k)} = \sum_{k=1}^{Np} [c_p \hat{u}^{(k)}(P) - \int_\Gamma u^* \hat{t}^{(k)} d\Gamma + \int_\Gamma t^* \hat{u}^{(k)} d\Gamma] \, \alpha^{(k)} \qquad (16)$$

Sustituyendo este valor en la expresión (12) se tiene finalmente:

$$c_p u(P) = \int_\Gamma u^* t \, d\Gamma - \int_\Gamma t^* u \, d\Gamma + \sum_{k=1}^{Np} [c_p u^{(k)}(P) - \int_\Gamma u^* \hat{t}^{(k)} d\Gamma + \int_\Gamma t^* \hat{u}^{(k)} d\Gamma] \alpha^{(k)} \qquad (17)$$

siendo importante observar que esta ecuación tiene todas sus integrales de contorno.

ELECCION DE LA FUNCION DE EXPANSION $\hat{f}^{(k)}$

La elección de las funciones de aproximación $\hat{f}^{(k)}$ en la ecuación (13) es fundamental para la exactitud del método.

Aproximación mediante ATPS

En un trabajo reciente, Golberg y Chen (1994) determinan que las funciones de aproximación óptimas son las llamadas "Augmented thin plate splines" (ATPS), las cuales son una combinacion lineal de "radial basis functions" (RBF) y funciones lineales.

Como en la formulación propuesta se debe aproximar el campo de temperaturas y su gradiente, se toma la función ATPS como combinación lineal de RBF y funciones cuadráticas.

De esta manera se puede escribir la ecuación (13) de la siguiente forma:

$$\theta(X) = \sum_{j=1}^{Np} f^{(j)}(X,Z^j) \, \alpha^j(Z^j) = \sum_{j=1}^{Nt} |X-Z^j|^2 \log|X-Z^j| \, \alpha^j + \alpha^{Nt-1} + x_1\alpha^{Nt-2} + x_2\alpha^{Nt-3} + x_1^2\alpha^{Nt-4} + x_1x_2\alpha^{Nt-5} + x_2^2\alpha^{Nt-6} \qquad (18)$$

Donde $X=(x_1, x_2)$; Z^j son un conjunto de Nt puntos no alineados, con N en el contorno y L interiores, mientras que α^j_k, j=1,..., Nt+6 son coeficientes incógnita.

En la aproximación mediante ATPS (Bridges y Wrobel, 1996) se debe verificar:

$$\sum_{j=1}^{Nt} \alpha^j = \sum_{j=1}^{Nt} x_1 \alpha^j = \sum_{j=1}^{Nt} x_2 \alpha^j = 0 \qquad (19)$$

Se tienen así seis ecuaciones adicionales, necesarias para determinar unívocamente los α^j, resolviendo el sistema $\theta = F\alpha$ que tiene la forma:

$$\begin{bmatrix} \theta(x^1) \\ \theta(x^2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \theta(x^{Nt}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{11} & \cdots & f_{1Nt} & 1 & x_1'' & \cdots & x_5' \\ f_{21} & \cdots & f_{2Nt} & 1 & x_1^2 & \cdots & x_5^2 \\ \cdot & \cdots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ \cdot & \cdots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot \\ f_{Nt1} & \cdots & f_{NtNt} & 1 & x_1^{Nt} & \cdots & x_5^{Nt} \\ 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_1' & \cdots & x_1^{Nt} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_2^1 & \cdots & x_2^{Nt} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_3^1 & \cdots & x_3^{Nt} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_4^1 & \cdots & x_4^{Nt} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_5^1 & \cdots & x_5^{Nt} & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha' \\ \alpha^2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha^{Nt} \\ \alpha^{Nt-1} \\ \alpha^{Nt-2} \\ \alpha^{Nt+3} \\ \alpha^{Nt-4} \\ \alpha^{Nt-5} \\ \alpha^{Nt+6} \end{bmatrix} \qquad (20)$$

La solución particular $\hat{u}$ de la ecuación (14) para un campo de temperaturas $\hat{f}$ dado por las funciones ATPS se puede determinar mediante el vector de Galerkin.

Se obtiene luego el vector tensión $\hat{t}$ a partir de $\hat{u}$ por medio de las ecuaciones:

$$\hat{E} = (\nabla\hat{u} + \nabla\hat{u}^t)/2 \qquad (21)$$

$$\hat{T} = 2\mu\hat{E} + \lambda(\mathrm{tr}\,\hat{E})I + m\hat{f}I \qquad (22)$$

$$\hat{t} = \hat{T}n \qquad (23)$$

Mediante el procedimiento anterior se obtienen:

1) para $\hat{f}^j = r^2 \log r$; j = 1, ..., Nt ; $r = |X - Z^j|$

$$\hat{u}_i = \frac{\alpha}{4}\frac{1+\nu}{1-\nu}(\log r - \frac{1}{4}).\, r^3 . r_{,i} \qquad (24)$$

$$\hat{t}_i = \frac{\alpha}{2}\frac{1+\nu}{1-\nu}\mu r^2[\frac{1}{2}(r_{,i}\frac{\partial r}{\partial n} - \frac{1}{2}n_i) + (\frac{1+2\nu}{1-2\nu}n_i + 2r_{,i}\frac{\partial r}{\partial n})\lg r] + m\, r^2 \log r\, n_i \qquad (25)$$

2) para $\hat{f}^{Nt-1} = 1 \Rightarrow \hat{u}_i = \frac{\alpha}{2}\frac{1+\nu}{1-\nu}x_i$; (26)

$$\hat{t}_i = \mu\frac{1+\nu}{1-\nu}\frac{\alpha}{1-2\nu}n_i + m\,n_i \qquad (27)$$

3) para $\hat{f}^{Nt+2} = x_1 \Rightarrow \hat{u}_i = \frac{\alpha}{2}\frac{1+\nu}{1-\nu}\delta_{1i}x_1^2$ (28)

$$\hat{t}_i = 2\mu\frac{1+\nu}{1-\nu}\alpha x_1(\delta_{1i}n_1 + \frac{\nu}{1-2\nu}n_i) + m x_1 n_i \qquad (29)$$

4) para $\hat{f}^{Nt-3} = x_2 \Rightarrow \hat{u}_i = \frac{\alpha}{2}\frac{1+\nu}{1-\nu}\delta_{2i}x_2^2$ (30)

$$\hat{t}_i = 2\mu\frac{1+\nu}{1-\nu}\alpha x_2(\delta_{2i}n_2 + \frac{\nu}{1-2\nu}n_i) + m x_2 n_i \qquad (31)$$

5) para $\hat{f}^{Nt-4} = x_1^2 \Rightarrow \hat{u}_i = \frac{\alpha}{3}\frac{1+\nu}{1-\nu}\delta_{1i}x_1^3$ (32)

$$\hat{t}_i = 2\mu\frac{1+\nu}{1-\nu}\alpha x_1^2(\delta_{1i}n_1 + \frac{\nu}{1-2\nu}n_i) + m x_1^2 n_i \qquad (33)$$

6) para $\hat{f}^{Nt-5} = x_1x_2 \Rightarrow \hat{u}_i = \frac{\alpha}{3}\frac{1+\nu}{1-2\nu}(\delta_{2i}x_1^3 + \delta_{1i}x_2^3)$; (34)

$$\hat{t}_i = \alpha\mu\frac{1+\nu}{1-2\nu}(x_1^2 + x_2^2)(\delta_{1i}n_2 + \delta_{2i}n_1) + m x_1 x_2 n_i \qquad (35)$$

7) para $\hat{f}^{Nt-6} = x_2^2 \Rightarrow \hat{u}_i = \frac{\alpha}{3}\frac{1+\nu}{1-\nu}\delta_{2i}x_2^3$ (36)

$$\hat{t}_i = 2\mu\frac{1+\nu}{1-\nu}\alpha x_2^2(\delta_{2i}n_2 + \frac{\nu}{1-2\nu}n_i) + m x_2^2 n_i \qquad (37)$$

Aproximación mediante RBF

Esta metodología fue desarrollada por Sensale (1994) y es análoga a la anterior tomando en la ecuación (18) Nt = Np y considerando $\hat{f}^{(j)} = 1 + r + r^2 + r^3$; j = 1, ..., Nt.

Mediante el procedimiento descrito en la sección anterior obtenemos las soluciones particulares:

$$\hat{u}_i = \frac{1+\nu}{1-\nu}\alpha(\frac{1}{2} + \frac{r}{3} + \frac{r^2}{4} + \frac{r^3}{5})\, r\, r_{,i} \qquad (38)$$

$$\hat{t}_i = 2\mu\alpha\frac{1+\nu}{1-\nu}\{[(\frac{1}{2} + \frac{r}{3} + \frac{r^2}{4} + \frac{r^5}{5}) + \nu(\frac{1}{2} + \frac{r}{3} + \frac{r^2}{4} + \frac{r^5}{5})]\frac{n_i}{1-2\nu} + (\frac{r}{3} + \frac{2r^2}{4} + \frac{3r^3}{5})r_{,i}\, r_{,j}\, n_j\} + m(1 + r + r^2 + r^3)n_i \qquad (39)$$

SOLUCION EN ELEMENTOS DE CONTORNO

Después de discretizar el contorno Γ en Ne elementos, con N puntos nodales, de aproximar los vectores desplazamiento y tensión en función de sus valores nodales y de aplicar la ecuación (17) con P coincidiendo con cada uno de los puntos nodales se llega al sistema de N ecuaciones:

$$H\,U - G\,T = (H\,U - G\,T)\,\alpha \quad \text{con } \alpha = F^{-1}\,\Theta \tag{40}$$

Aplicando las condiciones de contorno y colocando todas las incógnitas en el miembro de la izquierda, se obtiene el sistema (41), el cual permite obtener los vectores desplazamiento y tensión en los N puntos en que se discretizó el contorno.

$$A\,X = Y + (H\,U - G\,T)\,F^{-1}\,\Theta \tag{41}$$

El vector desplazamiento y el tensor de tensiones en los puntos interiores son calculados mediante las ecuaciones:

$$u(P) = \int_\Gamma \mathbf{u}^*\mathbf{t}\,d\Gamma - \int_\Gamma \mathbf{t}^*\mathbf{u}\,d\Gamma + \sum_{k=1}^{Np} [\,u^{(k)}(P) - \int_\Gamma \mathbf{u}^*\mathbf{t}^{(k)}\,d\Gamma + \int_\Gamma \mathbf{t}^*\mathbf{u}^{(k)}\,d\Gamma]\alpha^{(k)} \tag{42}$$

$$T(P) = \int_\Gamma \mathbf{D}^*\mathbf{t}\,d\Gamma - \int_\Gamma \mathbf{S}^*\mathbf{u}\,d\Gamma + \sum_{k=1}^{Np} [\,D^{(k)}(P) - \int_\Gamma \mathbf{D}^*\mathbf{t}^{(k)}\,d\Gamma + \int_\Gamma \mathbf{S}^*\mathbf{u}^{(k)}\,d\Gamma]\alpha^{(k)} \tag{43}$$

Donde $\mathbf{D}^*$ y $\mathbf{S}^*$ son tensores de tercer orden dados en Brebbia (1989); $D^{(k)}$ es un tensor de segundo orden tal que $D^{(k)}\,n = t^{(k)}$

EJEMPLOS

Para verificar la precisión del método propuesto se analizan algunos ejemplos en estado plano de tensiones, los que son analizados mediante la aproximación ATPS y la RBF.

Viga biempotrada sin fuente de calor interna

La geometría de la viga es dada en Fig. 1. El material de la viga tiene módulo de Young $E = 10^4$ MPa. , módulo de Poisson $\nu = 0.3$ y coeficiente de expansión térmica $\alpha = 10^{-3}$ / °K. Se realiza una discretización de 16 elementos (4 de cada lado de la viga).

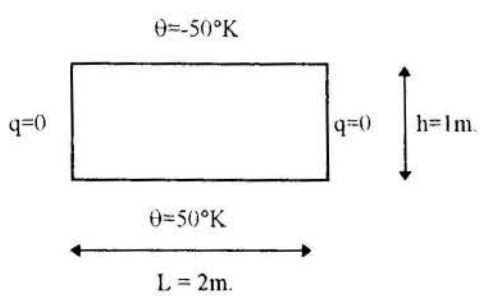


Figura 1 - Viga biempotrada sin fuente de calor interno

Los resultados obtenidos estan presentados en Tabla 1

Tabla 1 - Resultados obtenidos en la viga biempotrada sin fuente de calor interno.

Y/h	Temperaturas (°K)		Tensiones (kg/cm²)	
	Exacta	Calculada	Exacta	Calculada
-0.5	50	50	-5	-5
-0,375	37,5	37,5	-3.75	-3.75
-0,25	25	25	-2.5	-2.5
-0,125	12.5	12.5	-1.25	-1.25
0	0	0	0	0
0,125	-12.5	-12.5	1.25	1.25
0,25	-25	-25	2.5	2.5
0,375	-37,5	-37,5	3.75	3.75
0.5	-50	-50	5	5

Viga biempotrada con fuente de calor interna

El material de la viga tiene módulo de Young $E=10^4$ MPa. , módulo de Poisson $\nu = 0.3$, coeficiente de expansión térmica $\alpha = 10^{-3}$ / °K, el calor generado por unidad de volumen es $\rho = -0{,}48$ w/(°K cm³), y, la conductibilidad térmica K = 60 w/(°K cm). Se realiza una discretización de 30 elementos(10 de cada lado vertical de la viga)..

La geometría de la viga es dada en Fig. 2.

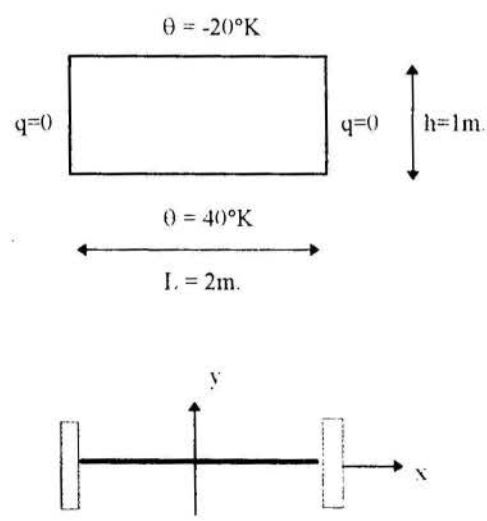


Figura 2 - Viga biempotrada con fuente de calor interno

Los resultados obtenidos estan presentados en la tabla 2, donde se muestra que la aproximación mediante ATPS converge a la solución exacta sin necesidad de puntos interiores, mientras que la aproximación RBF converge lentamente al aumentar la cantidad de puntos interiores.

Tabla 2 -Resultados obtenidos en la viga biempotrada con fuente de calor interno.

Y/h	Temperaturas (°K)		Tensiones (kg/ cm²)			
			Exacta	RBF		ATPS
				puntos interiores		
	Exacta	Calc.		0	25	0
-0,5	40	40	-4	-3,34	-4.12	-4
-0,4	30,4	30,4	-3,04	-2,47	-3,04	-3,04
-0,3	21,6	21,6	-2,16	-1,53	-2,12	-2,16
-0,2	13,6	13,6	-1,36	-0,70	-1,33	-1,36
-0,1	6,4	6,4	-0,64	0,02	-0,62	-0,64
0	0	0	0	0,64	-0,02	0
0,1	-5,2	-5,2	0,56	1,15	0,58	0,56
0,2	-10,4	-10,4	1,04	1,55	1,05	1,04
0,3	-14,4	-14,4	1,44	1,87	1,44	1,44
0,4	-17,6	-17,6	1,76	2,18	1,79	1,76
0,5	-20	-20	2	2,61	2,13	2
Y/h			ERRORES (%)			
-0,5		0,00		-16,57	2,88	0,00
-0,4		0,00		-18,63	-0,12	0,00
-0,3		0,00		-29,20	-1,88	0,00
-0,2		0,00		-48,76	-2,10	0,00
-0,1		0,00		-103,6	-2,40	0,00
0		—		—	—	—
0,1		0,00		105,05	3,01	0,00
0,2		0,00		49,17	0,85	0,00
0,3		0,00		30,19	0,15	0,00
0,4		0,00		23,93	1,97	0,00
0,5		0,00		32,52	6,35	0,00

Anillo sin fuente de calor interno

Se analiza un disco circular de 90 cm de radio exterior y 45 cm de radio interior, sometido a temperatura interior de ln45 (°K) y temperatura exterior de ln90(°K).

El material del disco tiene módulo de Young $E=2.1\times10^{1}$ MPa.,coeficiente de Poisson $\nu = 0,3$ y coeficiente de expansión térmica $\alpha = 10\times10^{-6}$ / °K.

Para estudiar este ejemplo se utilizan distintas mallas; debido a la simetría del problema, se discretiza sólo un cuarto de disco. La figura 3 muestra la discretización y la tabla3 los resultados obtenidos, donde se puede notar que la convergencia sin puntos interiores no es tan buena.por lo que se necesita agregar puntos interiores para mejorarla. En este caso, como en los anteriores, el campo de temperatura obtenido con este método coincide con el teórico.

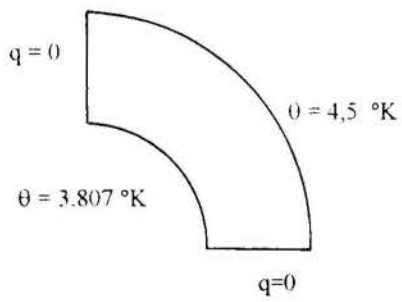


Figura 3 - Cuarto anillo sin fuente de calor interno

Tabla 3 a. - Resultados sin puntos interiores

Dist. radial (cm)	Teorica	Tensión Transversal ($\times10^{-2}$ kg/cm²) Numérica RBF			Numérica ATPS		
		Numero de Elementos					
		10	20	50	10	20	50
45	89,08	87,24	94,64	94,40	84,44	92,10	92,80
56,25	30,72	32,68	31,61	31,91	31,66	30,83	31,08
67,5	-7,40	-8,73	-8,22	-7,67	-8,20	-8,27	-8,23
78,75	-35,0	-36,9	-37,4	-36,9	-35,8	-35,9	-35,9
90	-56,6	-59,1	-58,7	-57,7	-55,2	-55,6	-56,3
Dist. rad.		ERRORES (%)					
45		-2,07	6,24	5,97	-5,21	3,39	4,17
56,25		6,40	2,91	3,90	3,06	0,35	1,18
67,5		17,97	11,01	3,55	10,81	11,64	11,18
78,75		5,43	6,83	5,19	2,2	2,47	2,42
90		4,51	3,86	1,98	-2,51	-1,70	-0,49
Dist. radial (cm)	Teorica	Desplazamiento radial ($\times10^{-4}$ cm) Numerica RBF			Numerica ATPS		
		Numero de Elementos					
		10	20	50	10	20	50
45	19,04	18,85	18,84	18,86	18,95	18,93	18,93
56,25	23,40	23,21	23,19	23,21	23,30	23,28	23,28
67,5	28,08	27,89	27,86	27,87	27,98	27,97	27,97
78,75	33,00	32,80	32,77	32,78	32,89	32,88	32,88
90	38,08	37,90	37,86	37,86	37,97	37,96	37,96
Dist. rad.		ERRORES (%)					
45		-1,00	-1,04	-0,95	-0,46	-0,58	-0,57
56,25		-0,82	-0,89	-0,82	-0,41	-0,49	-0,49
67,5		-0,70	-0,79	-0,76	-0,37	-0,42	-0,42
78,75		-0,61	-0,69	-0,66	-0,32	-0,37	-0,35
90		-0,46	-0,58	-0,57	-0,29	-0,32	-0,31

Tabla 3 b - Resultados con 50 elementos y puntos interiores

Dist. radial (cm)	Teorica	Tensión Transversal ($\times10^{-2}$ kg/cm²) Numérica RBF			Numérica ATPS		
		Numero de Puntos interiores					
		9	21	56	9	21	56
45	89,08	90,13	90,08	89,44	90,64	90,11	89,56
56,25	30,72	30,85	30,74	30,68	30,62	30,63	30,63
67,5	-7,40	-7,62	-7,67	-7,64	-8,10	-7,79	-7,66
78,75	-35,0	-35,3	-35,2	-35,0	-35,2	-35,2	-35,1
90	-56,6	-56,8	-56,7	-56,3	-56,1	-56,2	-56,2
Dist. rad.		ERRORES (%)					
45		1,18	1,12	0,41	1,75	1,16	0,53
56,25		0,44	0,06	-0,11	-0,33	-0,27	-0,29
67,5		0,44	0,06	3,14	9,40	5,19	3,52
78,75		2,92	3,55	0,01	0,32	0,34	0,10
90		0,45	0,37	-0,52	-0,90	-0,67	-0,76
Dist. radial (cm)	Teorica	Desplazamiento radial ($\times10^{-4}$ cm) Numerica RBF			Numerica ATPS		
		Numero de Puntos interiores					
		9	21	56	9	21	56
45	19,04	19,04	19,04	19,04	19,03	19,03	19,04
56,25	23,40	23,39	23,39	23,40	23,39	23,39	23,40
67,5	28,08	28,08	28,08	28,09	28,08	28,08	28,09
78,75	33,00	32,99	33,00	33,00	33,00	33,00	33,00
90	38,08	38,08	38,08	38,08	38,08	38,08	38,08
Dist. rad.		ERRORES (%)					
45		-0,02	-0,02	-0,01	-0,05	-0,03	-0,01
56,25		-0,02	-0,02	0,00	-0,04	-0,03	-0,01
67,5		-0,01	0,00	0,00	-0,01	-0,01	0,00
78,75		-0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,01
90		0,00	0,01	0,01	0,01	0,00	0,01

Anillo con fuente de calor interno

Se estudia el mismo disco circular del ejemplo anterior cuyo material tiene módulo de Young $E = 2.1\times10^4$ MPa. coeficiente de Poisson $\nu = 0.3$,coeficiente de expansión térmica $\alpha=10\times10^{-6}$/ °K., calor generado por unidad de volumen $\rho = -2{,}40$w/(°K cm^3), y, la conductibilidad térmica K = 60 w/(°K cm): sometido a temperatura interior de $4{,}5^2$ °K y temperatura exterior de $9{,}0^2$ °K..

Se discretiza solo cuarto disco debido a la simetria del problema. En tabla 4 figuran los resultados obtenidos, observándose que ambas aproximaciones convergen a la solución exacta sin necesitar puntos interiores, pues dicho campo de temperatura es correctamente representado. La aproximación ATPS converge mas rápidamente. En este caso, como en los anteriores, el campo de temperatura obtenido con este método coincide con el teórico.

Tabla 4 - Resultados obtenidos con fuente de calor interno

Dist. radial (cm)	Teorica	Tensión Transversal (kg/cm^2) Numérica RBF			Numérica ATPS		
		Numero de Elementos					
		10	20	50	10	20	50
45	63,78	62,99	63,80	63,90	63,03	63,48	63,65
56,25	30,53	30,51	30,21	30,41	30,48	30,36	30,57
67,5	0,30	0,07	0,12	0,21	0,26	0,17	0,25
78,75	-30,6	-30,4	-30,7	-30,6	-30,6	-30,8	-30,6
90	-63,8	-63,1	-63,2	-63,2	-62,8	-63,4	-63,8
Dist. rad.		ERRORES (%)					
45		-1,24	0,03	0,19	-1,18	-0,48	-0,20
56,25		-0,08	-1,04	-0,40	-0,16	-0,55	0,13
67,5		-75,3	-59,5	-28,9	-12,7	-41,0	-14,9
78,75		-0,76	0,15	-0,10	-0,21	0,52	-0,03
90		-1,09	-0,90	-0,93	-1,56	-0,62	0,01

Dist. radial (cm)	Teorica	Desplazamiento radial (cm x 10^{-2}) Numérica RBF			Numérica ATPS		
		Numero de Elementos					
		10	20	50	10	20	50
45	2,28	2,24	2,24	2,29	2,27	2,28	2,28
56,25	2,52	2,48	2,48	2,48	2,52	2,52	2,52
67,5	2,99	2,94	2,94	2,94	2,98	2,99	2,99
78,75	3,66	3,61	3,61	3,61	3,66	3,66	3,66
90	4,56	4,51	4,51	4,51	4,56	4,56	4,56
Dist. rad.		ERRORES (%)					
45		-1,87	-1,87	-1,87	-0,37	0,00	0,00
56,25		-1,61	-1,61	-1,61	-0,14	0,00	0,00
67,5		-1,43	-1,43	-1,43	-0,05	0,00	0,00
78,75		-1,22	-1,22	-1,22	0,04	0,00	0,00
90		-1,00	-1,00	-1,00	0,08	0,00	0,00

CONCLUSIONES

En este trabajo se presentó una formulación alternativa para el Método de Reciprocidad Dual aplicado a problemas termoelásticos desacoplados. En esta formulación, la distribucion de temperatura obtenida por un análisis de transferencia de calor en BEM es directamente usada para resolver el problema elástico sin necesidad de diferenciaciones especiales como en otras formulaciones del DRM.

Los ejemplos muestran que las dos aproximaciones usadas convergen a la solución exacta cuando el número de puntos de interpolación en la serie de aproximación aumenta. Pero en concordancia con los estudios matemáticos, las series ATPS convergen más rápidamente que las RBF. Se muestra que la aproximación ATPS aumenta la exactitud con poco esfuerzo extra de implementación.

REFERENCIAS

Brebbia, C.A. y Dominguez, J., 1989, "Boundary Elements: An Introductory Course", Computational Mechanics Publication, Southampton.

Bridges, T. R. y Wrobel, L. C., 1996, " A dual reciprocity formulation for elasticity problems with body forces using augmented thin plate splines", Accepted for publication in *Numerical Methods in Engineering*.

Danson, D.J., 1981, "A boundary element formulation of problems in linear isotropic elasticity with body forces", in C.A. Brebbia, Boundary Element Methods, Springer-Verlag, Berlin.

Golberg, M.A. y Chen, C.S., 1994, "The theory of radial basis functions applied to the BEM for inhomogeneous partial differential equations", *Boundary Elements Comunications*, vol.5.

Karur, S. R. y Ramachandran, P. A. , 1995, "Augmented Thin Plate Spline approximation in DRM", *Boundary Elements Communications*, vol.6.

Nardini, D. y Brebbia, C.A., 1982, "A New Approch to Free Vibration Analysis using Boundary Elements", BEM in Engineering, Computational Mechanics Publications, Southampton.

Neves, A.C. y Brebbia, C.A., 1992, "The Multiple Reciprocity Method applied to thermal stress problems", *Int. Jour. Numer. Methods Eng.*, vol. 35, 443-455.

Neves, A. C. y Brebbia, C. A., 1991, "The Multiple Reciprocity Boundary Element Method in Elasticity: A new approach for transforming domain integrals to the Boundary", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol.31, 707-727.

Partridge, P.W., Brebbia, C. A. y Wrobel, L.C., 1992, "The Dual Reciprocity Boundary Element Method", Computational Mechanics Publication, Southampton.

Sensale, B., Creus, G.J. y Partridge, P.W., 1994, "Aplicacion del metodo de reciprocidad dual a problemas termoelasticos mediante elementos de contorno", *Anales del XVCILAMCE*, M.G., Brasil, vol.1, 729-737.

ABSTRACT

An alternative formulation for the use of the DRM in BEM is proposed for thermoelastic uncoupled problems. In this formulation, the temperature distribution obtained by a heat transfer BEM analysis is directy used to solve the elasticity problem without need special derivations, as in some other DRM formulations.

The approximating functions in the DRM formulation are given in terms of "Augmented Thin Plate Splines" (ATPS). It is shown that the ATPS approximation provides improved accuracy with little extra implementation effort.

METODO INTEGRAL PARA LA SOLUCION DE SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS NO LINEALES

Raquel S. Cadoche, Enrique D. Negri y Mario G. Chiovetta
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
INTEC - (UNL - CONICET)
Güemes 3450 - (3000) Santa Fe - Argentina

RESUMEN

Se presenta un nuevo método para la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, no lineales, con condiciones iniciales o de contorno. Este tipo de sistemas es típico de problemas de transferencia de calor y materia, en ingeniería química, en sistemas unidimensionales. Se presenta la aplicación del algoritmo a la resolución de un modelo de reactor heterogéneo, unidimensional, de lecho móvil para la reducción directa de óxido de hierro y su comparación con otro método numérico.

INTRODUCCION

Se presenta un nuevo método para la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, no lineales, con condiciones iniciales o de contorno (Cadoche y otros, 1996). Este tipo de sistemas es típico de problemas de transferencia de calor y materia, en ingeniería química, en sistemas unidimensionales. Ecuaciones con orden superior se pueden siempre reducir a sistemas de primer orden.

El método desarrollado transforma el sistema de ecuaciones diferenciales original en un sistema de ecuaciones integrales (Delves y Walsh, 1974) equivalente, que se resuelve numéricamente. La primera razón para sugerir tal transformación es la característica de suavidad de respuesta que introduce la integración.

El método se construye en base a un esquema iterativo, similar al propuesto por Picard (Bailey y otros, 1968) para el tratamiento del problema de existencia y unicidad de la solución, para una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, con condiciones de contorno. Se desarrolla un algoritmo numérico secuencial iterativo optimizado, de resolución del sistema integral equivalente, presentándose estrategias novedosas de manejo y actualización de información.

OBJETIVO CENTRAL DEL METODO

El sistema que representa el problema responde originalmente a la forma genérica:

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(x, y_1, \ldots, y_n) \\ y_2' &= f_2(x, y_1, \ldots, y_n) \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1, \ldots, y_n) \end{aligned} \tag{1}$$

con condiciones conocidas de contorno o iniciales. La expresión vectorial correspondiente a (1) es:

$$\underline{y}' = \underline{f}(x, \underline{y}). \tag{2}$$

La ecuación (2) puede reescribirse, sin hipótesis adicionales, del siguiente modo:

$$\underline{y}' + \underline{\underline{G}}(x, \underline{y})\,\underline{y} = \underline{h}(x, \underline{y}), \tag{3}$$

siendo $\underline{\underline{G}}$ una matriz diagonal de funciones. Sobre esta ecuación (3), se desarrolla un procedimiento iterativo basado en el método de Picard (Bailey y otros, 1968), que desacopla el sistema, de modo que cada función incógnita y_i, $i=1,\ldots,n$, se resuelve usando la i-ésima ecuación, que es la única que contiene la derivada y_i'.

La solución de la i-ésima ecuación tiene inicialmente la forma:

$$\begin{aligned} y_i^{k+1}(x) = {} & c_i(x, y_1^k, \ldots, y_n^k) + \\ & \int_a^x h_i(s, y_1^k, \ldots, y_n^k) \\ & exp\left[-\left(\int_a^x g_i(t, y_1^k, \ldots, y_n^k)dt - \right.\right. \\ & \left.\left.\int_a^s g_i(t, y_1^k, \ldots, y_n^k)dt\right)\right] ds \quad , i = 1,2,\ldots,n, \end{aligned} \tag{4}$$

la constante de integración que aparece en la forma genérica de la solución general, que se determina usando la condición inicial o de contorno, se ha incluido en la función $c_i(x, y_1^k, \ldots, y_n^k)$ en (4).

El método centra los esfuerzos en optimizar la resolución numérica de la ecuación integral algebraica (4) genérica, ya que iterar directamente en (4) no es el procedimiento práctico más satisfactorio.

La convergencia queda asegurada automáticamente si el sistema original tiene solución única.

SOLUCION NUMERICA DEL SISTEMA INTEGRAL ALGEBRAICO

Las ecuaciones del sistema se resuelven secuencialmente y vía una técnica iterativa que se pasa a describir.

En una primera etapa las ecuaciones del sistema son ordenadas, de modo que se resuelvan primero las menos acopladas. En una segunda etapa se forman bloques de ecuaciones, siguiendo algún criterio. Un criterio consiste en formar cada bloque con aquellas ecuaciones con el mismo grado de acoplamiento, otro consiste en considerar dentro de un mismo bloque aquellas ecuaciones que tienen algún tipo de similaridad (por ej:que transmitan el mismo tipo de información física). En una tercera y última etapa los bloques se ordenan tal que los menos acoplados se resuelvan primero. El grado de acoplamiento de un bloque es considerado igual al de la ecuación más acoplada del bloque.

Para reflejar el reordenamiento, el índice genérico i de la ecuación (4) $i=1,\dots,n$ se reemplaza por el j_i, $j=1,\dots,n$, con j_i en correspondencia uno a uno con i. Así, $1\le j_i\le n$, y $j_i\ne j_k$ si $i\ne k$. La ecuación genérica toma la forma:

$$\begin{aligned} y_{j_i}^{k+1}(x) = {} & c_{j_i}(x, y_{j_1}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k}) + \\ & \int_a^x h_{j_i}(s, y_{j_1}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k}) \\ & exp\left[-\left(\int_a^x g_{j_i}(t, y_{j_1}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k})dt - \right.\right. \\ & \left.\left.\int_a^s g_{j_i}(t, y_{j_1}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k})dt\right)\right] ds. \end{aligned} \tag{5}$$

El intervalo continuo $[a,b]$ de la variable independiente x se discretiza con un conjunto de m puntos igualmente espaciados que llamamos grilla. Cada punto de la grilla tiene un valor: $x=x_r$, con $r=0,1,\dots,m-1$.

El procedimiento se basa en la aplicación de las ecuaciones dentro de un mismo bloque a todos los puntos de la grilla, de modo tal que cada nuevo resultado se use tan pronto como esté disponible.

Se introduce una matriz genérica $\underset{=}{A}$, tal que cada elemento de $\underset{=}{A}$ está dado por:

$$A(r+1,j) = y_{j_i}(x_r), \quad r=0,1,\dots,m-1;\ j=1,2,\dots,n \tag{6}$$

El índice j en $\underset{=}{A}$ sigue la secuencia del sistema reordenado de ecuaciones, de modo tal que los bloques se identifican en $\underset{=}{A}$ a través de subconjuntos de columnas adyacentes, con $r=0,1,\dots,m-1$. Un bloque (l) se considera resuelto cuando todos los elementos $A(r+1,j)$ se han computado una vez usando la ecuación (5), para $r=0,1,\dots,m-1$ y $j=\beta,\beta+1,\dots,\gamma-1,\gamma$; siendo β y γ los números de las columnas más a la izquierda y más a la derecha respectivamente, en el bloque (l). Como los valores de las variables en cada elemento de $\underset{=}{A}$ son usados como los parámetros en el lado derecho de la ecuación (5), el procedimiento usa la información más reciente evaluada en todo momento del cálculo. Esta técnica, que denominaremos "refrescado" de los valores, se implementa con el objetivo de reducir el tiempo de cómputo.

La aplicación de la mencionada técnica a la ecuación (5) conduce a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} y_{j_i}^{k+1}(x) = {} & c_{j_i}(x, y_{j_1}^{k+1}, \dots, y_{j_{i-1}}^{k+1}, y_{j_i}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k}) + \\ & \int_a^x h_{j_i}(s, y_{j_1}^{k+1}, \dots, y_{j_{i-1}}^{k+1}, y_{j_i}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k}) \\ & exp\left[-\left(\int_a^x g_{j_i}(t, y_{j_1}^{k+1}, \dots, y_{j_{i-1}}^{k+1}, y_{j_i}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k})dt - \right.\right. \\ & \left.\left.\int_a^s g_{j_i}(t, y_{j_1}^{k+1}, \dots, y_{j_{i-1}}^{k+1}, y_{j_i}^{k}, \dots, y_{j_n}^{k})dt\right)\right] ds. \\ & 1\le j_i\le n \quad ; \quad j=1,2,\dots,n \end{aligned} \tag{7}$$

con $x=x_r$, $r=0,1,\dots,m-1$.

Para hacer más efectivo el refrescado, en cada bloque (l) formado por $p=(\gamma-\beta+1)$ columnas de $\underset{=}{A}$, los $m\times p$ elementos de $\underset{=}{A}$ a ser evaluados han de seguir cierta secuencia, para optimizar el uso de los valores de contorno conocidos, a saber:

a) Si todas las condiciones de contorno para las ecuaciones en las columnas β a γ están dadas en el extremo izquierdo del intervalo $[a,b]$, los p elementos en los m subconjuntos $[A(r+1,\beta), A(r+1,\beta+1),\dots,A(r+1,\gamma)]$ se resuelven secuencialmente en este orden, manteniendo r constante. El índice r toma los valores $0,1,\dots,m-1$ para cada subconjunto.

b) Si todas las condiciones de contorno para las ecuaciones en las columnas β a γ están dadas en el extremo derecho del intervalo $[a,b]$, los p elementos en los m subconjuntos $[A(r+1,j), j=\beta,\beta+1,\dots,\gamma)]$ se resuelven secuencialmente siguiendo j, manteniendo r constante. El índice r toma los valores $m-1,m-2,\dots,0$ para cada subconjunto.

c) Si las condiciones están dadas en $x=b$ para algunas de las ecuaciones y en $x=a$ para el resto de ellas en el bloque (l), ambos índices en $\underset{=}{A}$ pueden variar simultáneamente, manteniendo la siguiente relación entre la j-ésima ecuación y el punto α_j de la grilla donde la ecuación es resuelta ($1\le\alpha_j\le m$): los p elementos en cada uno de los m subconjuntos $[A(\alpha_j,j), j=\beta,\beta+1,\dots,\gamma]$ son resueltos siguiendo j. El índice α_j toma los valores $\alpha_j=1,2,\dots,m$ si la condición de contorno para la columna j está dada en $x=b$, y $\alpha_j=m,m-1,\dots,1$ si dicha condición está dada en $x=a$.

El cálculo de los elementos de $\underset{=}{A}$, en término de bloques de ecuaciones integrales algebraicas con la forma (5) implica dos pasos aplicados a cada elemento de $\underset{=}{A}$, que son:

a) la integral es evaluada,
b) la ecuación algebraica resultante es resuelta.

Para la integración numérica el subintervalo correspondiente a cada punto puede ser $[a,ru+a]$ o $[b-ru,b]$. Sobre cada subintervalo se sugiere el empleo del método de Simpson combinado con la regla del 3/8 aplicada sobre los cuatro últimos puntos del subintervalo considerado (Delves y Walsh, 1974; Linz, 1985).

Para la resolución de las ecuaciones algebraicas, en general no lineales, resultantes, se sugiere la combinación del método de sustitución directa con el de aceleración de la convergencia de Wegstein (Wegstein, 1968) aplicado sobre alguna(s) de la(s) variable(s) del sistema. Usualmente la(s) variable(s) más apropiadas para ser acelerada(s) es(son) aquella(s) más fuertemente dependiente(s) del resto en el bloque o sistema a ser resuelto.

Finalmente debe implementarse un adecuado test de convergencia numérica, que no se describe aquí. Solo diremos que deben considerarse tres niveles de convergencia a ser chequeados:

a) Convergencia de variables.
b) Convergencia de bloque.
c) Convergencia global:
   c-1. Todos los bloques en el sistema convergen.
   c-2. Todos los m puntos en columna j de $\underset{\sim}{A}$ verifican, con la precisión requerida, la j-ésima ecuación discretizada para j=1 a n.

APLICACION DEL METODO

Se presenta resumidamente la implementación del algoritmo para la resolución de un modelo de reactor heterogéneo, unidimensional, de lecho móvil para la reducción directa de óxido de hierro (Negri y otros, 1991, 1995). El reactor, modelado con siete ecuaciones de balance de materia y energía para las fases intervinientes, es no isotérmico y está en estado estacionario. La fase sólida se modela con tres frentes de reacción móviles. Se comparan los resultados con los obtenidos con un método de "shooting" modificado, utilizado originalmente para resolver este sistema altamente dependiente de las condiciones de contorno. El problema propuesto se resolvió con claras ventajas para el método integral desarrollado.

Ecuaciones del Modelo

Con las hipótesis mencionadas más arriba se llega al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias adimensional, que representa los balances de materia y energía para las fases gas (8 - 9) y sólida (10 - 11):

$$\frac{dY_i}{du} = \gamma_i \frac{1}{\theta_g}\left(\frac{C_{i,p}}{C x_R} - Y_i\right) \tag{8}$$

$$\frac{d\theta_g}{du} = T_1\left(\theta_s - \theta_g\right) \tag{9}$$

$$\frac{d\xi_j}{du} = \frac{1}{3f_j}\alpha\left(Da_{H_2,j}\Omega_{H_2,j} + Da_{CO,j}\Omega_{CO,j}\right) \tag{10}$$

$$\frac{d\theta_s}{du} = \frac{\beta}{1-w^0_{ox}R}\left[T_1(\theta_s-\theta_g) - \sum_{\substack{I=H_2,\\ CO}}\sum_{j=1}^{3}\Phi_{I,j}Da_{I,j}\xi_j^2\Omega_{I,j} - \Phi_w N_w\right] \tag{11}$$

donde i = H_2, CO , j = 1,2,3, N_w representa el flujo interfacial debido a la reacción de conversión de agua, y las condiciones de contorno se pueden escribir:

$$Y_i(u=0) = Y_i^0 \;;\; (i = H_2, CO) \qquad \theta_g(u=0) = \theta_g^0$$
$$\xi_j(u=1) = 1 \;;\; (j = 1,2,3) \qquad \theta_s(u=1) = \theta_s^0 \tag{12}$$

La variable independiente u representa la posición axial adimensional en el reactor, Y_i las composiciones de agentes reductores en la fase gas, ξ_j las posiciones de los frentes de reacción móviles en la fase sólida, θ_g la temperatura de la fase gas y θ_s la temperatura de la fase sólida.

Solución Numérica y Algoritmo Computacional aplicado al Problema. El sistema gas-sólido reaccionante resultante presenta dos niveles de resolución: a) el pellet (nivel a escala micro), y b) el reactor (nivel macro). Todas las consideraciones realizadas son válidas para la resolución del reactor (escala macro). Para el pellet se usa el modelo de Negri y otros (1987, 1991).

El sistema (8)-(12) no tiene solución analítica conocida. Para aplicar el método descripto definimos el vector y de (2), por componentes, para el problema del reactor:

$$y_i(u) = Y_i(u) \quad ,i = 1,2 \tag{13}$$

$$y_3(u) = \theta_g(u) \tag{14}$$

$$y_{3+j}(u) = \xi_j(u), j=1,2,3 \tag{15}$$

$$y_7(u) = \theta_s(u), \tag{16}$$

y para las condiciones de contorno:

$$y_k(0) = y_k^0 \quad ,k = 1,2,3$$
$$y_k(1) = y_k^0 \quad ,k = 4,5,6,7 \tag{17}$$

ya que en el reactor, la fase gaseosa ingresa por el extremo inferior y el sólido por el extremo superior.

Se reescribe el sistema (13) - (16) bajo la forma genérica (3). Se lo desacopla incorporando iteraciones. Se elige la k-ésima ecuación del sistema, reescrito por componentes, conteniendo la derivada primera de y_k como la ecuación a resolver para obtener y_k. Se propone una resolución secuencial iterativa.

Las ecuaciones se agrupan en tres bloques, que son:

$$\left\{\xi_j, j=3,2,1\right\}, \left\{\theta_g, \theta_s\right\}, \left\{Y_i, i=\mathrm{H}_2,\mathrm{CO}\right\}, \tag{18}$$

que luego se reordenan, resultando:

$$\left\{Y_i, i=\mathrm{H}_2,\mathrm{CO}\right\}, \left\{\xi_j, j=3,2,1\right\}, \left\{\theta_g, \theta_s\right\}. \tag{19}$$

El "refrescado" se aplica a los bloques uno y tres. No es posible aplicarlo al bloque de los radios, por restricciones que los mismos deben cumplir.

Se siguen todos los pasos del algoritmo original, cuya implementación no se detalla por razones de extensión.

Destacaremos que la secuencia de integración considerada es:

a) Para cada u^* discreto las ecuaciones para Y_1^{k+1} e Y_2^{k+1} se resuelven una vez, en este orden, con u^* desde 0 hacia 1.

b) Para cada j, $j=3,2,1$, se resuelve para ξ_j^{k+1}, con incremento negativo para la integración, con u^* desde 1 hasta 0.

c) Para cada valor fijo discreto de u, generalmente distinto para θ_g y θ_s, se resuelven secuencialmente θ_g^{k+1} y θ_s^{k+1}, en este orden. Para θ_g el incremento es positivo, mientras que para θ_s el incremento es negativo.

Para cada incógnita, una ecuación algebraica no lineal resulta de aplicar el método de integración sugerido en la descripción general del método. Se acelera la convergencia

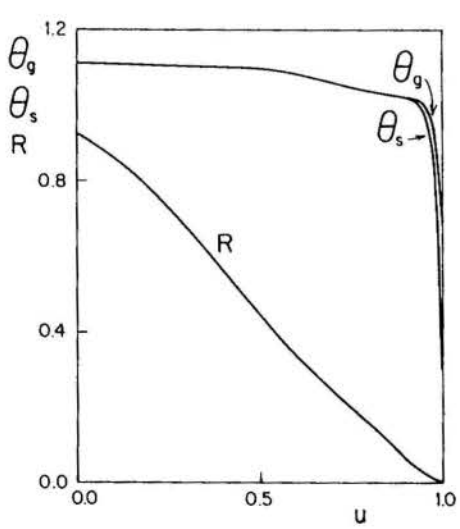


Figura 1 - Perfiles típicos de temperatura y conversión

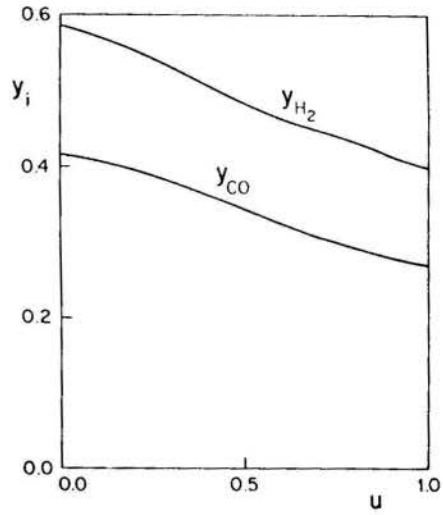


Figura 2 - Perfiles típicos de concentración

solamente de θ_g, pues resulta la más acoplada de las siete variables, la única para la cual la iteración es posible sólo a través de otra incógnita del sistema (θ_s), y está en el único bloque con las condiciones dadas en ambos extremos del intervalo [0,1], lo cual implica que es la que más dificultades de convergencia tiene posibilidades de presentar.

Resultados Computacionales. Para reactores de 1m de largo se presentan las Figuras 1 a 3, con resultados obtenidos con el método integral.

En las Fig. 1 y 2 se presentan perfiles axiales de temperatura de ambas fases, composiciones de agentes de reducción, y grado de reducción de la fase sólida. Se analizan condiciones típicas de los procesos industriales, con una relación gas-sólido α de alimentación de 2.8.

La Figura 3 muestra la variación del grado de reducción en la base del reactor (R(u = 0)), y la variación de la utilización global de los agentes de reducción, ($\eta(u=1)$) con α.

Se analizan y comparan resultados computacionales obtenidos con el método integral y con un método alternativo de "shooting" modificado (Negri y otros, 1991), para distintos valores de α y un reactor de 1m . A su vez los resultados del método alternativo se compararon con resultados experimentales publicados (Negri y otros, 1991), mostrando ser representativos. Las diferencias entre los resultados computacionales de ambos métodos numéricos son despreciables., pero para todos los casos de interés práctico (valores de α pequeños) los tiempos de computación son comparativamente más bajos para el método desarrollado (Tabla 1). El método de "shooting" modificado se inicializa con convergencias anteriores. En los tiempos presentados en la Tabla 1 no se han considerado los tiempos previos necesarios para lograr tales convergencias.

El programa fue escrito en FORTRAN 77, y ejecutado en un entorno DIGITAL VAX11/780, con sistema operativo VMS.

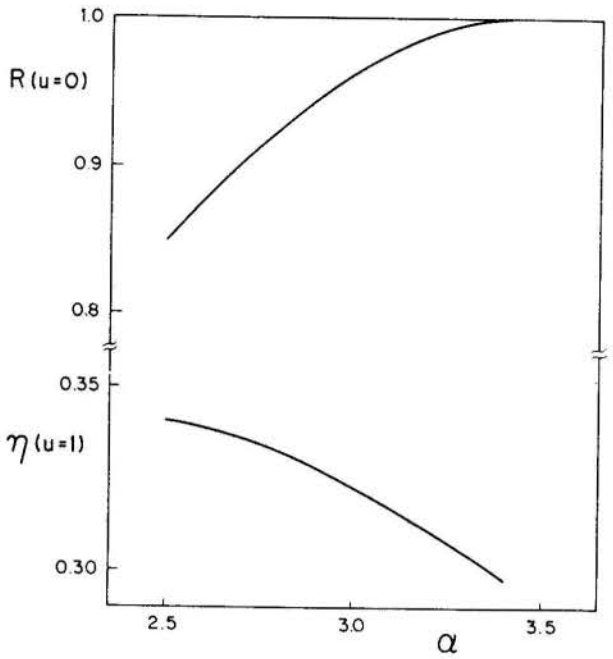


Figura 3 - Conversión y utilización total en función de α

CONCLUSIONES

Además de lo ya mencionado en la introducción podemos agregar algunos comentarios interesantes.

La manipulación algebraica requerida es mínima comparada con la de otras técnicas numéricas, como cuasilinearización o diferencias finitas, manipulación que aumenta los riesgos de errores. El método no exige la existencia de una representación funcional explícita, lo cual resulta muy importante pues para estos casos no es posible la aplicación de técnicas de cuasilinearización.

En resumen, las características más destacadas del método son:

a) es conceptualmente simple,
b) puede aplicarse a todos los casos, virtualmente sin restricciones,
c) es robusto (casi independiente de la inicialización),
d) es estable,
e) requiere tiempos comparativamente reducidos de computación, debido fundamentalmente a los procedimientos permanentes de refrescado de la información.

Tabla 1 - Comparación de tiempos de ejecución (minutos)

α	Método de "shooting" modificado	Método integral
2.5	135	62
2.8	127	66
3.1	115	80
3.4	87	79

Los elementos antes citados lo tornan una alternativa interesante comparada con otras disponibles para la solución de problemas típicos de ingeniería de las reacciones.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue parcialmente financiado con fondos de CONICET, PID-BID 3-0098000/88 y CONICET, PID-BID 3-0201-1006/92.

REFERENCIAS

Bailey P.B., Shampine L.F. y Waltman P.E., 1968, "Non-Linear Two Point Boundary Value Problems", Academic Press, New York.

Cadoche R.S., Negri E.D. y Chiovetta M.G., 1996, "An Integral Method for the Numerical Solution of Systems of Nonlinear Ordinary Differential Equations. I. Description of the Method and Application to Typical Problems", enviado para publicación a Comp. and Chem. Eng..

Delves L.M. y Walsh J., 1974, "Numerical Solution of Integral Equations", Clarendon Press, Oxford.

Linz, P., 1985, "Analytical and Numerical Methods for Volterra Equations", Siam, Philadelphia.

Negri E.D., Alfano O.M. y Chiovetta M.G., 1987, "Direct Reduction of Hematite in a Moving Bed. Comparison Between One- and Three-Interface Pellet Model", Chem. Eng. Sci., Vol. 42, pp. 2472-2475.

Negri E.D., Alfano O.M. y Chiovetta M.G., 1991, "Direct Reduction of Hematite in a Moving-Bed Reactor. Analysis of the Water Gas Shift Reaction Effects on the Reactor Behavior", Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 30, pp. 474-482.

Negri E.D., Alfano O.M. y Chiovetta M.G., 1995, "Moving-Bed Reactor Model for the Direct Reduction of Hematite. Parametric Study", Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 34, pp. 4266-4276.

Wegstein, J.H., 1958, "Accelerating Convergence of Iterative Processes", Commun. Asoc. Comp. Machinery, Vol. 1, Nro. 6, pp. 9-13.

ABSTRACT

INTEGRAL METHOD FOR THE SOLUTION OF NON-LINEAR ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS

A powerful new numerical method for solving first order, non linear, ordinary differential equations, with either initial or boundary conditions, is presented. Then, the algorithm is implemented for the numerical resolution of the mathematical model of an heterogeneous, unidimensional, moving bed reactor, for the direct reduction of iron ores. Finally, computed results are discussed and compared with the ones given by other technique. Excellent numerical agreement was obtained, with better computing times, and others important advantages for the method presented.

NUMERICAL MODELLING OF THE MINI-CLIME IN A SPORTS STADIUM

Juan G. Sosa and Eduardo A. Brizuela
Dep. Ing. Mecánica, Univ. Nacional de Mar del Plata, 7600 Mar del Plata - Argentina
John H. Kent
Dept. of Mech. and Mechatronic Engineering, Univ. of Sydney, NSW 2006, Australia

SUMMARY

The design of ambient control systems for large public areas such as theatres and sports arenas exceeds the predictive capacity of conventional techniques due to the formation of mini-climes due to natural convection, heat and humidity given off by the public, forced ventilation inlets and outlets, etc. Numerical simulation of the flow and temperature fields is used to analyze a sports stadium which confirms an unsatisfactory design. The use of these modelling techniques prior to constructing the system is recommended.

INTRODUCTION

The detail analysis and design of heating/air conditioning in the case of large public halls (theatres, stadia) exceeds the predictive capacity of conventional techniques, due to the generation of mini-climes due to natural convection, heat and humidity given off by the public, the placing of ventilation outlets, etc.

Numerical simulation can be used to obtain a more detailed prediction which can assist in the design of the ventilation or air conditioning system. This was done, for example, for the design of the swimming complex for the SYDNEY2000 Olympics, where the code named AIRCON was used.

The present work shows the results of the numerical simulation of the mini-clime in the Estadio Polideportivo (Multi-Sports Stadium) of the city of Mar del Plata in Argentina, which was built for the XII Panamerican Games held in 1995.

The code used was a modified version of the abovenamed AIRCON, a computer program written in FORTRAN language, especially developed for the prediction of air flows in closed environments with air conditioning. The code was originally written by J. H. Kent at Sydney University (Kent, 1994).

The purpose of the task was to obtain numerical solutions of the air flow and concentrations of water vapor, to be able to plot patterns of temperature, relative humidity and air velocity, to be used in the verification of the heating/ventilation system design.

THE MULTI-SPORTS STADIUM

Description. The Multi-Sports Stadium is a closed hall measuring approximately 90x70 m, with an average height of 20 m. It has a capacity of 6500 seated spectators, and is used for various team sports such as basketball, volleyball, handball and gymnastics. Figure 1 shows a quarter section with some details of geometry and main dimensions.

The stadium is located in a temperate/cold zone, and hence only ventilation and heating were provided for. Heating levels and air renewal were specified to keep ambient air at 22°C average, and recommended levels of relative humidity for comfort.

The Heating/ventilation System. This consists of two superimposed air flow circuits: recirculation and air renewal.

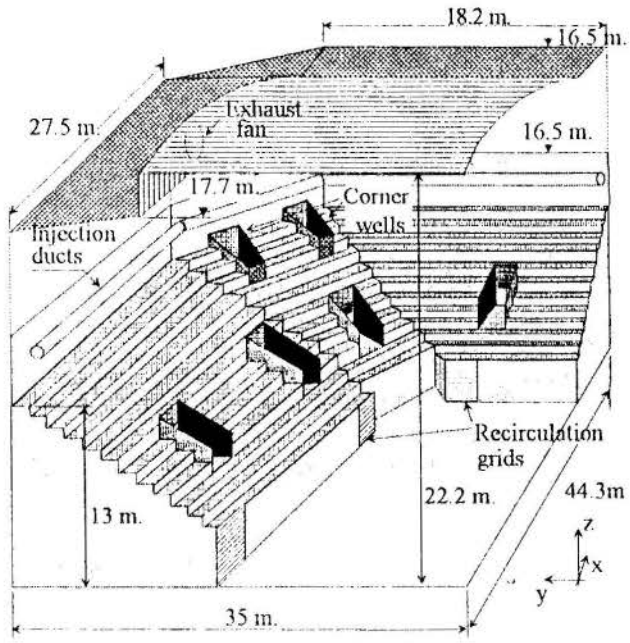


Figure 1 - Sketch of a quarter of the main hall

The first circulates by design 992 m^3/min which are taken off at playing level, heated if required, and reinjected by means of ventilation ducts placed near the ceiling. The second circuit takes approximately 2548 m^3/min of fresh outside air which is heated as required, mixed with the first flow, and reinjected via the same points. Vitiated air is extracted using four exhaust fans placed on the roof and it also exits via doors and various openings, due to the hall being slightly overpressurised.

The heating system is common to both circuits and consists of hot water boilers and water-air radiators, with a total installed power of 2.5 MW.

Inside the hall the air is heated further due to the public, and is humidified by the public's respiration and perspiration.

The hall can be considered symmetrical with respect to the center vertical planes, and is thus divided into four quarters for this study. The air flow entering each quarter via the ventilation ducts amounts to 885 m^3/min. The roof extractor fan removes

504 m^3/min, and the grids at playing level extract and recirculate 248 m^3/min. The remainder (133 m^3/min, or 15% of the inlet flow) exits via the corner wells, doors and openings, to the gallery surrounding the main hall.

Energy Balances. The enthalpy balance inside the hall is:

$$h_{in}+h_{sens}=h_{out}+h_{loss} \quad (1)$$

where *sens* stands for the sensible heat given off by the public and *loss* for the heat losses through the walls and floor (the ceiling is thermally insulated). There is also a component of enthalpy due to the fact that humidity given off by the public is produced at near body temperature whilst it leaves the stadium at exit temperature. This component is neglected as it amounts to about 1% of the enthalpy of the circulating fluid. The heat required to evaporate perspiration and water vapor in respirated air (latent heat) is provided by the public bodies, and as such does not enter in the fluid enthalpy balance.

The control parameter is the temperature, and other flow parameters are only checked to verify they fall within acceptable limits. The heating system varies the temperature of the air flowing into the hall (recirculated plus renewal) as required to keep the temperature of the air extracted via the play level grids at the design value of 22°C.

Because of the sensible heat given off by the public a situation may arise where not only is heating not necessary, but even without heating the temperature at the control point will exceed the design value. This condition depends on the temperature of the exterior (renewal) air and the amount of public present, and is termed *the limit temperature condition.* Beyond this point it is not possible to control the hall's ambient since there is no provision for cooling the air flow.

The inlet air flow is a mixture of recirculating and exterior air. The enthalpy balance at the air heating/mixing cabins is:

$$h_{in}=h_{rec}+h_{ext}+h_{heat} \quad (2)$$

Under limit temperature conditions $h_{heat}=0$. Substituting h_{in} from Eq. (1) and rearranging:

$$h_{ext}=h_{out}+h_{loss}-h_{sens}-h_{rec}. \quad (3)$$

With the air flow rates given above, 72% of the air injected into the hall is fresh and 28% recirculated. Hence, if m is the total air mass flow rate:

$$h_{ext}=0.72\ m\ Cp\ T_{lim} \quad (4)$$

$$h_{rec}=0.28\ m\ Cp\ T_{out} \quad (5)$$

$$h_{out}=m\ Cp\ T_{out} \quad (6)$$

where we have made the exterior temperature equal to the limit value, and the exit temperature T_{out} is assumed uniform everywhere in the hall. Hence, substituting into Eq. (3) and rearranging:

$$T_{lim}=(m\ Cp\ T_{out}+h_{loss}-0.28\ m\ Cp\ T_{out}-h_{sens})/(0.72m\ Cp) \quad (7)$$

Values substituted are Cp=1000 m^2/sec^2K, T_{out}=22°C, m=17.7 kg/sec. The sensible heat was calculated for the full stadium (1625 persons per quarter) as 171 KW (105 W per person).

Losses through the walls and floor were estimated as follows: assuming unity Lewis number:

$$Le=Pr/Sc \quad (8)$$

we obtain:

$$\lambda=\mu_t Cp/Pr \quad (9)$$

The turbulent viscosity μ_t was estimated from the Law of the Wall (Rodi, 1984) with a 10% turbulence on an average velocity of 1.0 m/sec, resulting in:

$$\mu_t=1.5 \times 10^{-3}\ kg/m\text{-}sec \quad (10)$$

With a typical Prandtl Number of 0.7 the conductivity results λ=2.2 W/m-K. Floor and wall temperatures for the cold months were estimated at 8 and 12°C respectively, which yielded a heat loss

$$h_{loss}=\Sigma\ \lambda\ \Delta AT/\ \Delta x \quad (11)$$

of approximately 30 KW (This was confirmed by the simulation results).

With these values the *limit temperature* from Eq. (7) is 10.9°C.

NUMERICAL SIMULATION

Equations Solved. The method consists in discretizing by the Finite Volume Method and solving the conservation equations for the various scalars given by the general form:

$$\frac{\partial \rho\phi}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u\phi + J_\phi\right) = S^\phi \quad (12)$$

where ϕ is the general scalar, J_ϕ is the diffusive flux and S^ϕ is the source/sink term. The diffusive flux is modelled using a form of Fick's law of diffusion:

$$J_\phi = -\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \quad (13)$$

where Γ_ϕ is the diffusivity, equal to the turbulent viscosity divided by the turbulent Prandtl/Schmidt number.

We solve conservation equations for mass (ϕ=1), momentum (ϕ=u, v, w), the two-equation turbulence model ($\phi=\kappa,\varepsilon$), enthalpy (ϕ=h) and mass fraction of water vapor ($\phi=Y_{H2O}$). The flow is considered steady, incompressible, whence the source terms are:

$$S^u = -\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_u\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_u\frac{\partial v}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_u\frac{\partial w}{\partial x}\right) \quad (14)$$

$$S^v = -\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_u\frac{\partial u}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_u\frac{\partial v}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_u\frac{\partial w}{\partial y}\right) \quad (15)$$

$$S^w = -\frac{\partial p}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_u\frac{\partial u}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_u\frac{\partial v}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_u\frac{\partial w}{\partial z}\right)-g(\rho_0-\rho) \quad (16)$$

$$S^\kappa = G + G_B - \rho\varepsilon \quad (17)$$

$$S^\varepsilon = [C_1(G+max(G_B,\ 0)) - C_2\rho\varepsilon]\frac{\varepsilon}{\kappa} \quad (18)$$

where (19)

$$G=\mu_t\left\{2\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2\right]+\left(\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial z}+\frac{\partial w}{\partial y}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right\}$$

$$G_B = g\,\frac{\mu_t}{\sigma}\,\frac{1}{\rho}\,\frac{\partial \rho}{\partial z} \quad \text{(Buoyancy contribution)} \tag{20}$$

Note that according to the model (Rodi, 1985), only the positive buoyancy contribution is included.

The turbulent viscosity is calculated from the two-equation model as:

$$\mu_t = C_u \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \tag{21}$$

and the Prandtl/Schmidt numbers σ are 1.0 for the Navier-Stokes equations, 0.9 and 1.22 for κ and ε, and 0.7 for h and Y_{H2O}. The two-equation model constants are C_1=1.44 and C_2=1.92 and C_u=0.09.

The source terms for enthalpy and mass fraction of water are given as sensible heat added/lost, and as mass of water added, per unit time and per unit projected area, respectively.

With the mass fraction of water Y_{H2O}=mass of water/mass of mixture, the molar mass fraction is computed as:

$$X_{H2O} = \frac{W}{W_{H2O}} Y_{H2O} \quad \text{(W = Molecular mass)} \tag{22}$$

and the relative humidity as:

$$RH = \frac{p_{H2O}}{p_{H2O,s}} = \frac{p X_{H2O}}{p_{H2O,s}} \tag{23}$$

where p is the pressure, and the saturation pressure $p_{H2O,s}$ is obtained from a look-up table for the temperature.

The conservation equations are discretized using the Hybrid Method (Patankar, 1980), using a finite volume technique. The discretized equation is finally written:

$$a_P\phi_P = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + a_T\phi_T + a_B\phi_B + b \tag{24}$$

where P stands for at the center point of the cell, E, W, N, S, T and B the six spatial directions (including Top and Bottom), and b is the constant part of the source term, if any, which has been linearized as:

$$S^\phi = \phi SP^\phi + SU^\phi \tag{25}$$

$$b = SU^\phi \tag{26}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B - SP^\phi \tag{27}$$

The discretization is done over a Cartesian grid of 50x43x36 cells in the (x,y,z) directions, with finer grids where required. Figure 2 shows the resulting model of the quarter.

The resulting system of linear difference equations is solved by the Alternating Direction Implicit (ADI) method, including over-relaxation as desired.

Boundary and Test Conditions. Simulation of the bodies of the public would have required a much finer grid on the stands, which was considered unjustified for the purpose of the present work. Hence, the public was only represented by their contribution in sensible heat and water vapor, in other respects being part of a solid wall surface (the stand).

Boundary cells are of four types: Wall, Inlet, Outlet and Symmetry. Boundary conditions for each type cell are given as Dirichlet or Neumann conditions as follows:

For wall type cells, u=v=w=0, the Law of the Wall applies, and Dirichlet conditions apply to enthalpy and water mass fraction (=0), except for the stands. In these we apply source terms of sensible heat and production of water vapor of 105 W and 0.04 g/sec of water per person, with a density of three persons per square meter of projected stand surface for the full stadium.

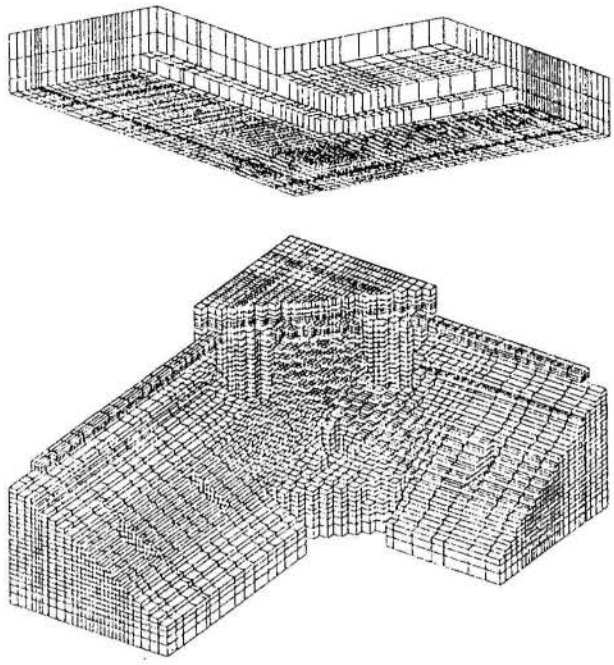


Figure 2 - Model Grid

For inlet type cells we apply Dirichlet conditions to velocity, enthalpy and water mass fraction, and Neumann conditions (nil gradient) to all others.

For outlet type cells we apply Dirichlet conditions to the tangential components (=0) and Neumann conditions to all others (nil gradient).

For symmetry type cells we apply Neumann conditions (total flux equals zero) in the normal direction.

Simulation results. Computations were performed with various combinations of external conditions and public load. On a standard 486PC and without using the multigrid facility, successfull runs were completed in approximately 3 hours.

The results shown here correspond to the full stadium and to an audience of 20% capacity, both with an external temperature of 11°C (limit case).

Figure 3 shows velocity vectors and temperature contours whilst Figure 4 shows contours of relative humidity, both on an Y-Z plane passing through the center of the roof exhaust fan, for the full audience. Figure 5 corresponds to Figure 3, but for 20% audience.

Figures 6 and 7 show line contours of constant temperature on planes of constant x and y coordinate, for the full audience.

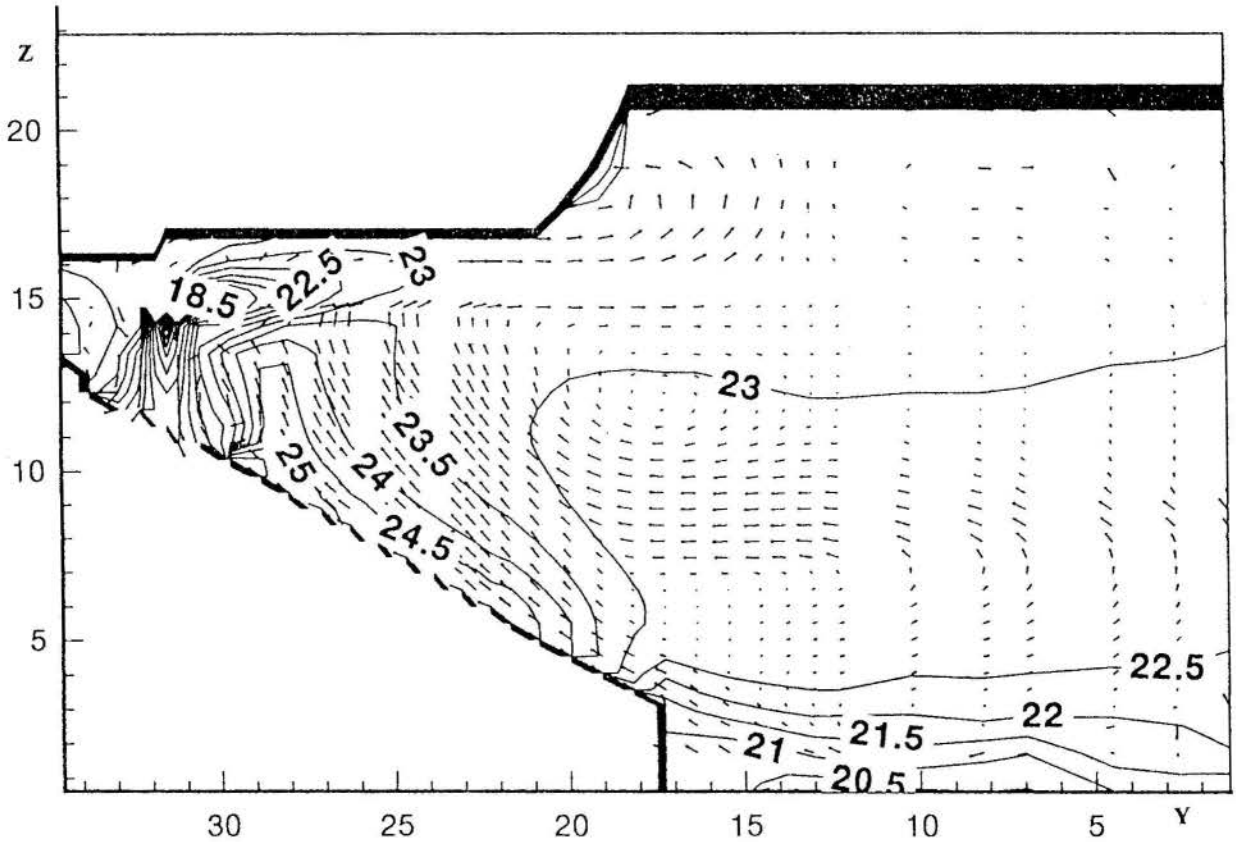


Figure 3 - Temperature and velocity, full audience

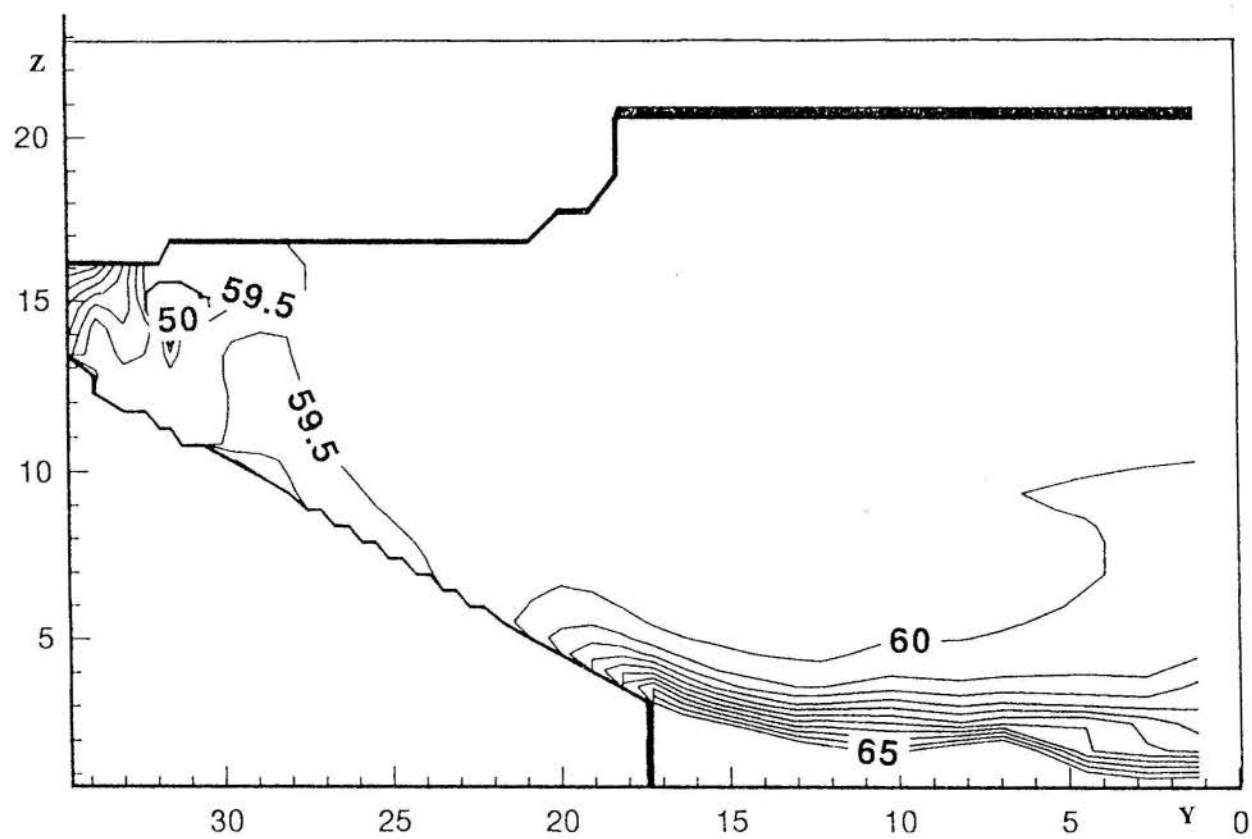


Figure 4 - Contours of relative humidity, full audience

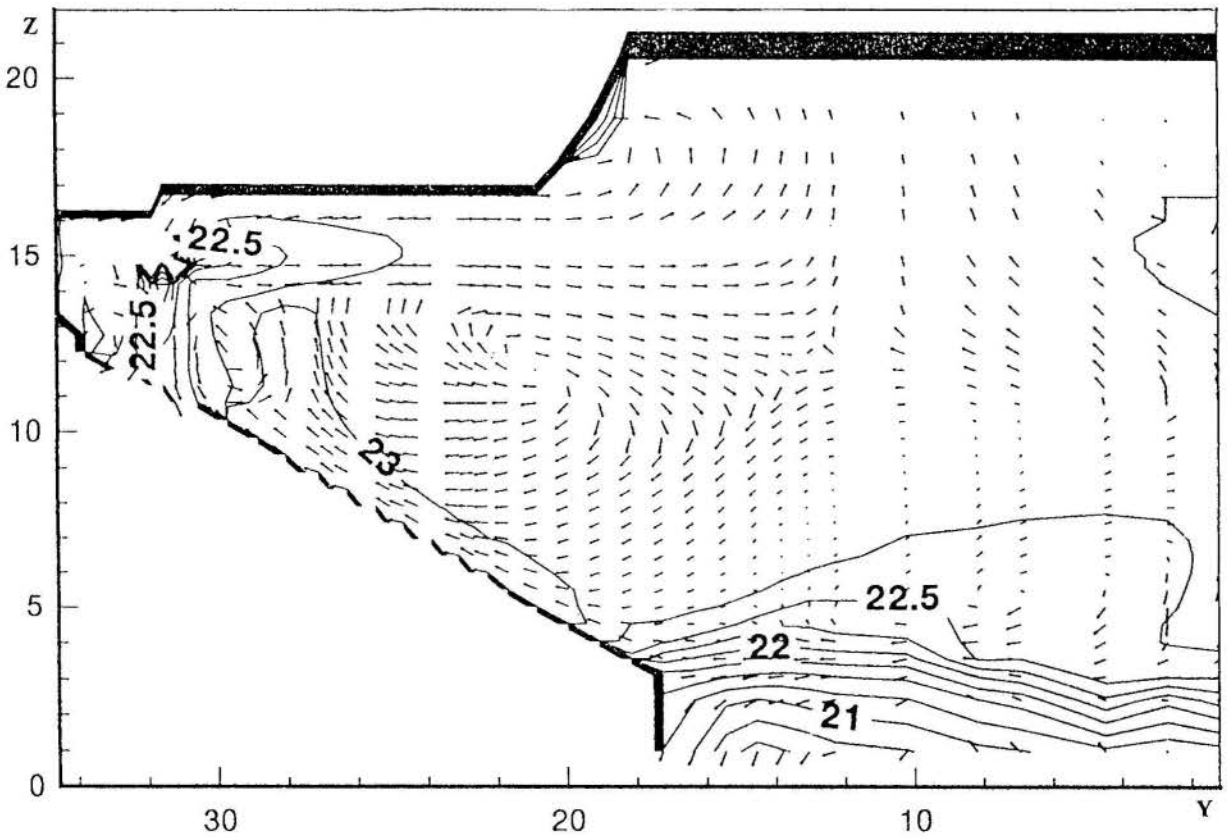


Figure 5 - Temperature and velocity, 20% audience

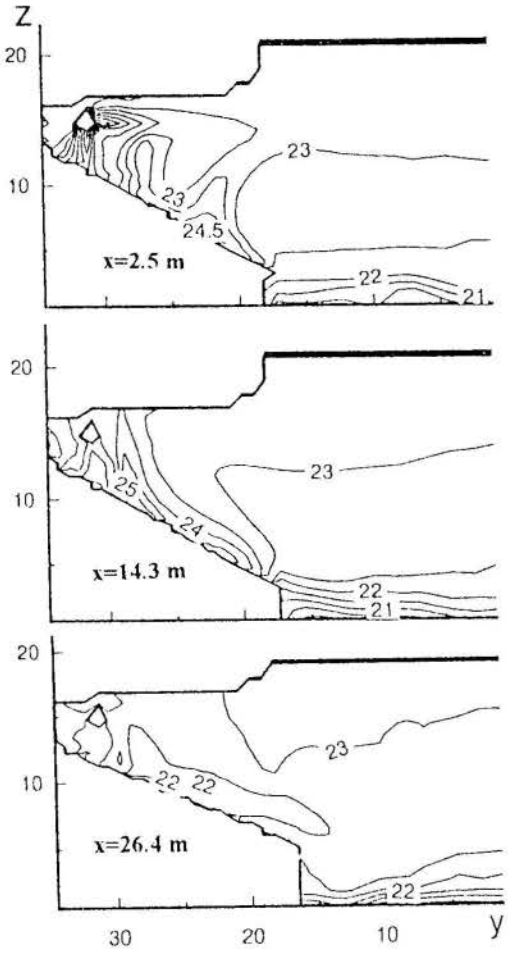


Figure 6 - Temperature contours, sections along X axis

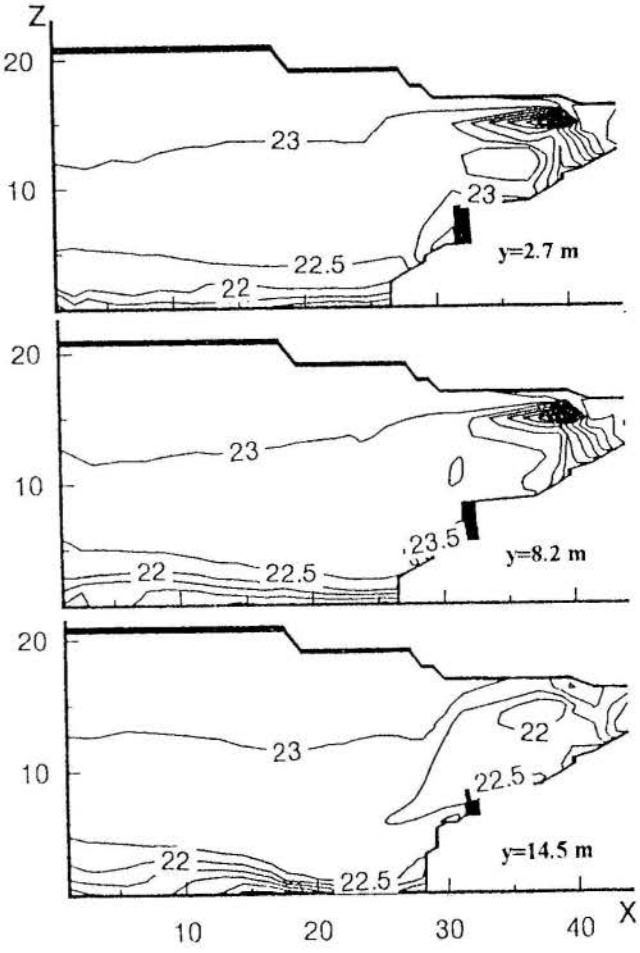


Figure 7 - Temperature contours, sections along Y axis

DISCUSSION AND CONCLUSIONS

The first few occasions on which the stadium was used gave the impression that the ambient control system was not entirely adequate. Direct observation of ambient conditions with approximately 50% audience confirmed a large degree of stratification of the air near the play floor, poor air renewal, and excessive temperature and humidity at the stands. With an external air temperature of 13°C, the temperature at playing level was 21°C (within specs), but reached 27°C at the stands.

Numerical simulation results confirm these observations and show their origin: natural convection is dominant over the stands and the sensible heat given off by the public causes the observed temperature rises. The air injection system is not adequate: the vertical injection ports can not overcome the hot air rising from the stands, and the horizontal ports are largely ineffective, directing the recirculating/renewal air flow straight onto the exhaust fan. Relative humidity does not appear excessive, although this is probably due to the relative humidity of the renewal air on the day of the observations being higher than used in the computations.

The use of Cartesian grids resulted in difficulties in modelling features with curved surfaces (roof, ducting) and those oblique to the axes (corner stands), and Boundary Fitted Coordinates would have saved modelling effort. However, the results show that the lesser accuracy did not prevent a useful analysis. Clearly the use of numerical modelling of the internal mini-clime of large public areas must be highly recommended to verify a design before it is executed.

REFERENCES

Kent, J. H.; "Air conditioning modelling by Computational Fluid Dynamics", *Architectural Science Review*, Vol 37, pages 103-113, Sept. 1994.

Patankar, S. V., 1980; "Numerical heat transfer and fluid flow", Hemisphere Publishing, 1980.

Rodi, W., 1984; "Turbulence models and their applications in Hydraulics", International Association of Hydraulic Research, Rotterdam, February 1984.

Rodi, W., 1985; "Calculation of stably stratified shear-layer flows with a buoyancy extended $\kappa-\varepsilon$ turbulent model", in *Turbulence and Diffusion in stable environments*, J. C. R. Hunt (Editor), pages 111-140, Clarendon Press, Oxford, 1985.

INFLUENCIA DE LA VENTILACION NATURAL EN LA TEMPERATURA DEL AIRE INTERIOR DE VIVIENDAS: MEDICIONES EXPERIMENTALES

María E. Sosa, Luis A. Rosales

Instituto de Desarrollo Experimental de la Construcción , Facultad de Arquitectura y Urbanismo de la Universidad Central de Venezuela

Caracas-Venezuela

RESUMEN

La realización de mediciones térmicas en dos conjuntos de viviendas ubicados en la ciudad de Barquisimeto, Venezuela, permitió estudiar dos casos de ventilación natural y su influencia sobre la temperatura del aire de los ambientes internos. El procedimiento consistió en medir simultáneamente la temperatura del aire interior, la temperatura del aire exterior, la velocidad del viento incidente y la velocidad del aire en diferentes puntos de los ambientes. Con ello se pudo apreciar cómo la ventilación natural reduce la temperatura interior y el desfase de tiempo entre los valores pico de las temperaturas exterior e interior.

INTRODUCCION

El análisis de la calidad de las propuestas habitacionales implementadas en Venezuela durante los últimos años evidencia poca preocupación por los aspectos ambientales. El resultádo son viviendas de comportamiento térmico inadecuado, que atentan contra el bienestar de los usuarios. Una consecuencia es que se apela constantemente a equipos mecánicos de climatización, lo que acarrea considerables gastos de instalación, uso y mantenimiento.

No obstante, se ha comprobado que para las características del clima venezolano, un apropiado diseño basado en climatización natural conduce en muchos casos a condiciones adecuadas de bienestar térmico. Es por ello que en el Instituto de Desarrollo Experimental de la Construcción (IDEC) de la Facultad de Arquitectura y Urbanismo de la Universidad Central de Venezuela, se efectúan estudios orientados hacia el desarrollo de métodos de diseño bioclimático, al tiempo que se informa sobre los alcances de las iniciativas que entre tanto se realizan, mediante la difusión de resultados parciales y ejemplos de demostración. Dentro de esta estrategia global se enmarca la presentación de este texto, ejemplo ilustrativo de los beneficios que ofrece la ventilación natural en la calidad térmica de las viviendas construidas en regiones de clima tropical húmedo como el venezolano.

El objetivo del estudio consistió en desarrollar una metodología para determinar la velocidad del aire en el interior de las viviendas; y asimismo evaluar la influencia de la ventilación natural en la temperatura del aire interior. Representa los resultados y analisis de mediciones experimentales en sitio.

DESCRIPCION DE LAS VIVIENDAS EXPERIMENTALES

Las mediciones térmicas se realizaron en dos conjuntos residenciales ubicados en la ciudad de Barquisimeto, Venezuela. Esta ciudad se encuentra en las coordenadas 10°07´N - 64°41´O, a una altitud de 590 m sobre el nivel del mar. La temperatura media anual es aproximadamente 25°C, la temperatura máxima 30°C, la humedad relativa 77% y la radiación solar media diaria 540 cal/cm^2. La dirección predominante del viento es NE y la velocidad media anual es 3,3 m/s (Bernal F.A., 1983). Si se toma como referencia el diagrama bioclimático propuesto por Givonni para el diseño de viviendas mediante ventilación natural (Givonni B., 1978), se puede afirmar que las particularidades meteorológicas antes descritas brindan la posibilidad de lograr condiciones de confort térmico aceptable.

La figura 1A muestra el primer conjunto de viviendas experimentales, el cual denominaremos Conjunto Residencial A. Se indica la orientación del conjunto, la numeración asignada a cada casa y la dirección predominante de los vientos. Cada unidad de vivienda tiene 46m^2, distribuidos en una sola planta. El sistema constructivo es una estructura metálica de mallas electrosoldadas de acero laminado sobre las cuales se proyectó mortero de concreto, conformándose una cámara de aire no ventilada. Los techos son en pendiente a dos aguas y teja asfáltica como acabado final exterior.

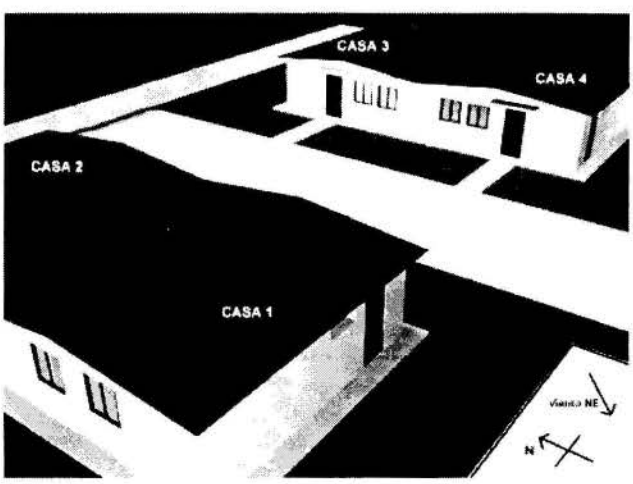


FIGURA 1A - CONJUNTO RESIDENCIAL A

El segundo conjunto residencial (Conjunto Residencial B) es una larga hilera de viviendas adosadas entre sí (figura 1B). Cada unidad de vivienda tiene 120 m^2, repartidos en tres niveles. Las fachadas posteriores se encuentran al lado de un área verde de grandes proporciones, por lo que los vientos se reciben en forma franca. El sistema constructivo es el mismo del Conjunto Residencial A.

Considerando que sólo se pretende tener una apreciación general de la influencia de la ventilación, se omitió el efecto producido por el muro de lindero y las casas, tomándose como referencia del viento los valores medidos dentro de los límites

de la parcela. Para la fecha de las mediciones, los dos conjuntos residenciales estaban recién construidos y se encontraban sin objetos ni ocupantes.

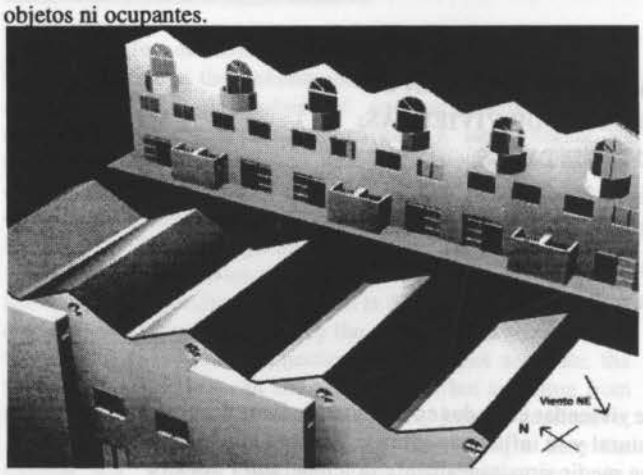


Figura 1B - Conjunto residencial B

VELOCIDAD DE AIRE EN EL INTERIOR DE LAS VIVIENDAS EXPERIMENTALES

El método consistió en tomar mediciones simultáneas de la velocidad del viento en un punto en el exterior ubicado a sotavento y a la misma altura de las ventanas y de la velocidad del aire en varios puntos de cada ambiente. Los resultados se extrapolaron para una velocidad de viento de 1 m/s (velocidad de aire/ velocidad de viento).

Con estos valores se dibujaron mallas que dan una primera imagen de cómo varía la velocidad del aire en los ambientes internos. A manera de ejemplo, se muestra en la figura 2 la malla obtenida para el segundo piso del Conjunto Residencial B.

Mallas como ésta permitieron calcular y trazar las líneas de igual velocidad de aire (isolíneas de velocidad). A continuación

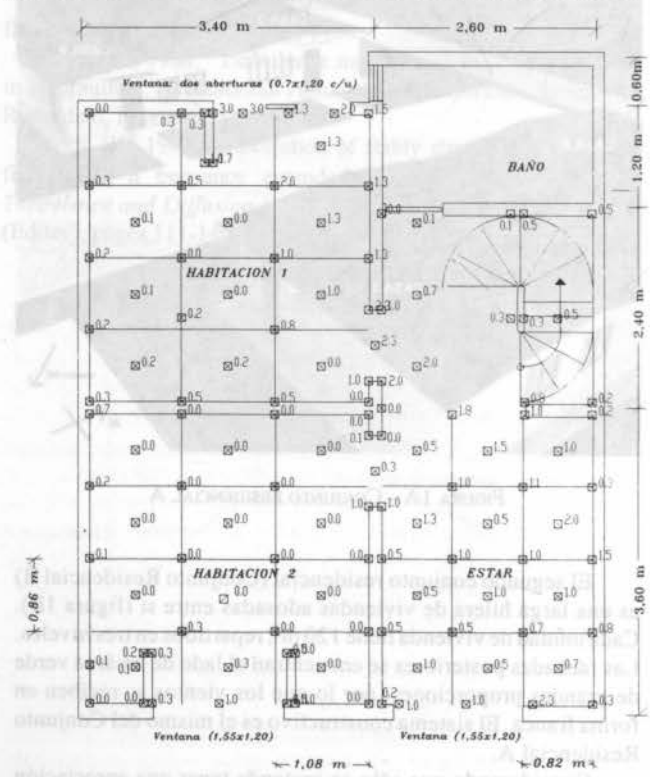


Figura 2 - Velocidad del aire interior/velocidad del viento incidente

se muestran y se comentan brevemente los resultados obtenidos en las Casas 2 y 3 del Conjunto Residencial A (figuras 3A y 3B) y en la Planta Baja y el Primer Piso del Conjunto Residencial B (figuras 4A y 4B).

Si se comparan las figuras 3A y 3B (Conjunto Residencial A), se aprecia cómo difieren los flujos de aire en el ambiente

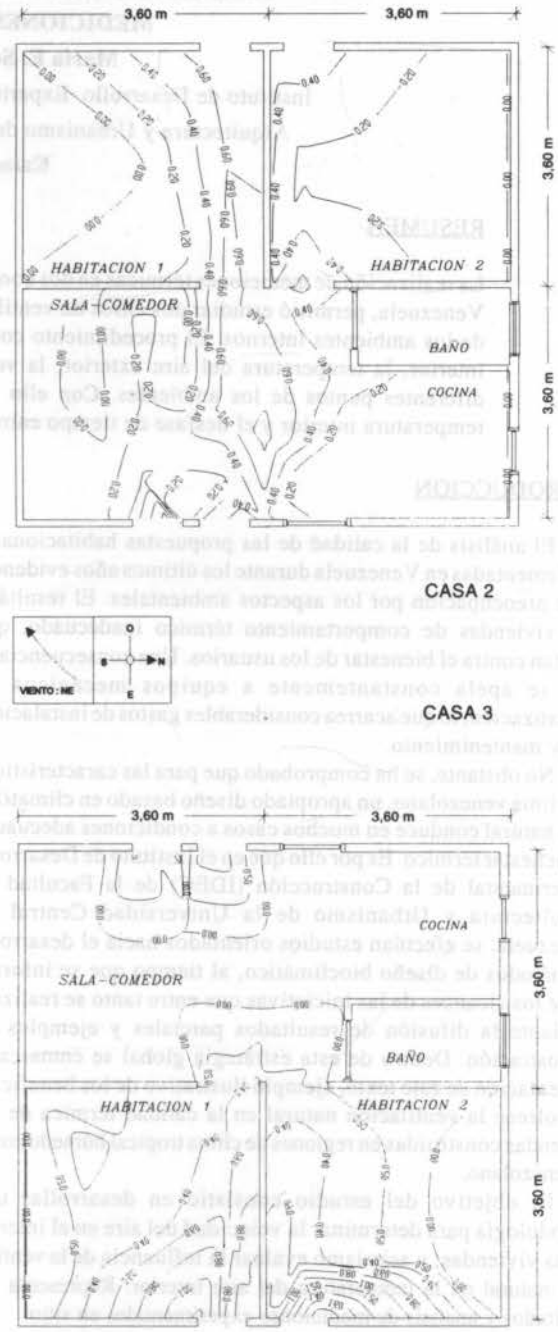
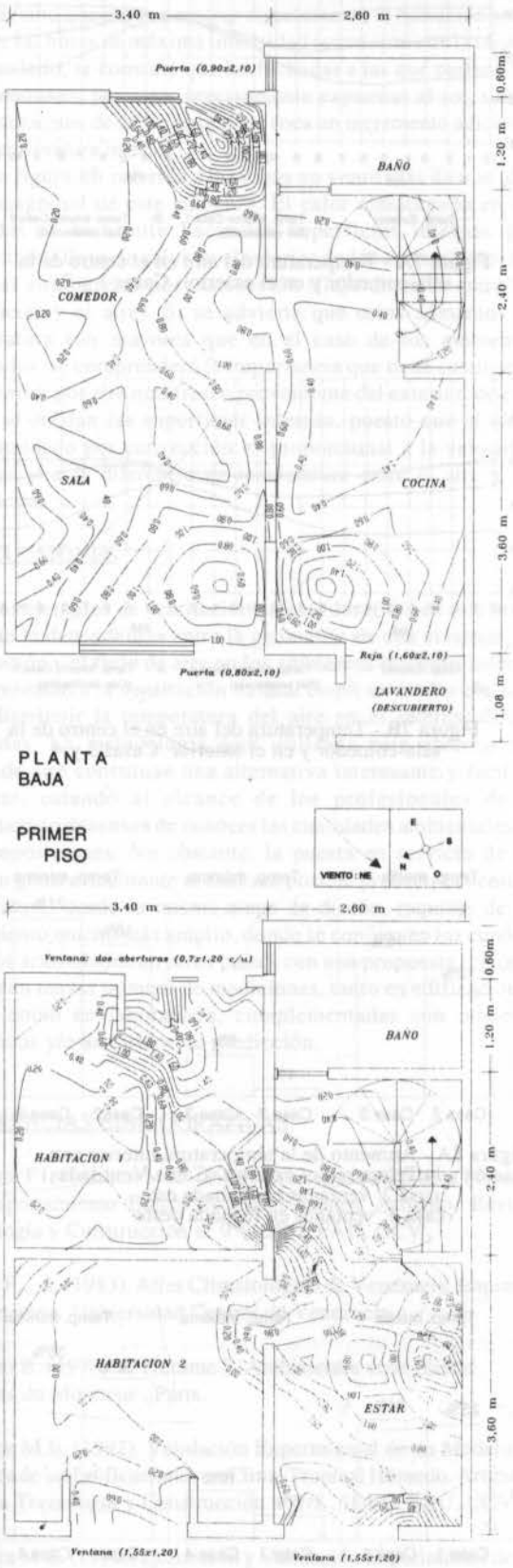


FIGURA 3A y 3B - VELOCIDAD DE AIRE INTERIO / VELOCIDAD DE VIENTO INCIDENTE. CONJUNTO RESIDENCIAL A

Sala-comedor cuando el viento penetra a través de ventanas de fachadas opuestas: en la casa 2 se produce una mejor repartición del flujo, por transitar el aire desde un ambiente de mayor dimensión hacia ambientes de menor tamaño, generándose un estrangulamiento en las puertas y un aumento de la energía cinética; por el contrario, en la casa 3, al pasar el aire desde las Habitaciones hacia la Sala-comedor, se produce una disminución de la energía cinética.

Las isolíneas de velocidad del Conjunto Residencial B (figuras 4A y 4B) ilustran la tendencia del aire a mantener su flujo natural: en la Planta Baja, la ausencia de un muro de separación entre los ambientes Sala y Comedor genera una mejor repartición de aire en todo el piso; por el contrario, en el Primer Piso, casi todo el aire penetra por la Habitación 1 y sale por el Estar, con poca tendencia a desviarse por la Habitación 2.

El mismo método se utilizó para medir la velocidad del aire en las ventanas, lo que a su vez permitió estimar el caudal que atraviesa la vivienda. La figura 5 muestra las isolíneas de velocidad de aire en las ventanas del Primer Piso del Conjunto Residencial B. En este caso, el viento llega del noreste sin encontrar obstáculos y penetra por la fachada posterior. La elevada velocidad con la cual éste penetra se debe a la barrera de grandes proporciones que constituye toda la hilera de viviendas, generándose en las ventanas un considerable aumento de velocidad. Por esta razón se hizo evidente que no existía eje neutro (linea que define para una ventana la frontera entre el flujo saliente y el flujo entrante). Se puede suponer que la pequeña diferencia entre los valores obtenidos para el caudal de entrada y el caudal de salida se debe a la presencia de la escalera.



Figuras 4A y 4B - Velocidad de aire interior / Velocidad de viento incidente Conjunto Residencial B

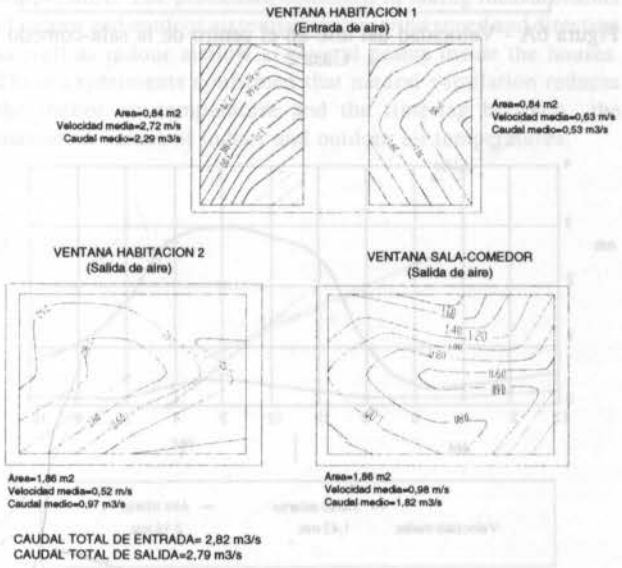


Figura 5 - Velocida del aire en las ventanas / velocidad del viento incidente. Conjunto residencial B. Ventanas del primer piso.

INFLUENCIA DE LA VENTILACION EN LA TEMPERATURA DEL AIRE INTERIOR

Con la finalidad de apreciar la influencia de la ventilación en la temperatura del aire interior, se hicieron mediciones comparativas de temperatura en el centro de los ambientes Sala-comedor de las cuatro casas del Conjunto Residencial A, manteniendo las ventanas de las casas 2 y 3 abiertas y las de las casas 1 y 4 cerradas. Asimismo se midió la velocidad del aire en las casas 2 y 3, que fueron las que permanecieron con las ventanas abiertas (figuras 6A y 6B). Todas estas mediciones fueron el resultado de registros continuos hechos durante dos períodos consecutivos de duración una semana, correspondiendo la primera semana a las casas 1 y 2 y la segunda semana a las casas 3 y 4.

La figuras 6A y 6B ratifican la influencia de la orientación de las ventanas en la velocidad del aire en el ambiente Sala-comedor: en la casa 2, donde el aire penetra por las ventanas de dicho ambiente, la velocidad interior es aproximadamente 60% de la velocidad del viento incidente; en la casa 3, donde el aire penetra por las habitaciones, la velocidad interior es tan solo 10% de la velocidad del viento incidente.

Las figuras 7A y 7B muestran el promedio diario de la temperatura del aire en el ambiente sala-comedor de las casas 1 y 4 (sin ventilación), de las casas 2 y 3 (con ventilación) y del exterior.

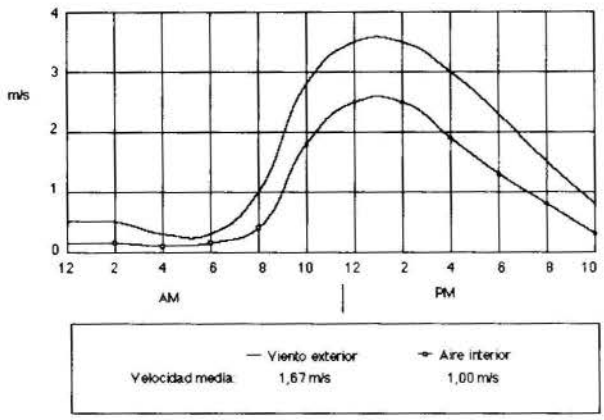


Figura 6A - Velocidad del aire en el centro de la sala-comedo Casa 2

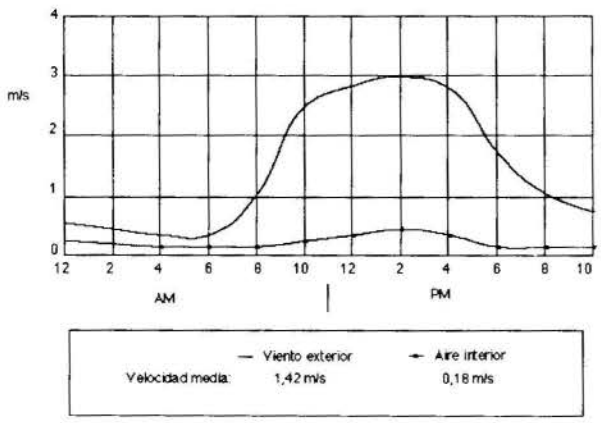


FIGURA 6B - VELOCIDAD DEL AIRE EN EL CENTRO DE LA SALA-COMEDOR . CASA 3

Se aprecia que en las casas sin ventilación la temperatura del aire interior varía poco a lo largo del día; esto se debe al efecto amortiguante de los cerramientos, efecto que se acentúa considerablemente cuando se aislan los ambientes internos; por lo mismo, las temperaturas máxima, media y mínima interior son bastante mayores que en el exterior; igualmente se produce un desfase de 3 horas entre las temperaturas máximas exterior e interior.

Cuando se abren las ventanas (casas 2 y 3), los intercambios de aire entre el exterior y el interior provocan temperaturas interiores intermedias entre aquellas que tienen las casas sin ventilar y el extèrior; disminuyen los valores medios, máximos y mínimds, así como el desfase entre las temperaturas máximas exterior e interior (de 3 horas a 1 hora).

Como ya se mencionó, las casas 2 y 3, de orientaciones opuestas, se mantuvieron ventiladas; por su parte, las casas 1 y 4, también de orientaciones opuestas, se mantuvieron sin ventilar. Una comparación entre los aumentos de la temperatura interior referidos a la temperatura exterior para los ambientes Sala-comedor de las casas ventiladas por un lado y las no ventiladas por el otro, permite apreciar la influencia de la orientación de la vivienda (figuras 8A y 8B).

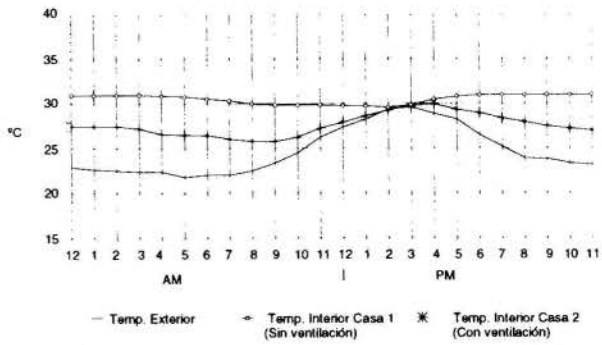


Figura 7A - Temperatura del aire en el centro de la sala-comedor y en el exterior. Casas 1 y 2.

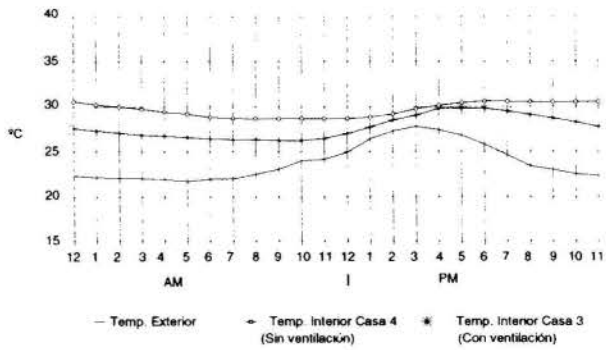


Figura 7B - Temperatura del aire en el centro de la sala-comedor y en el exterior. Casas 3 y 4.

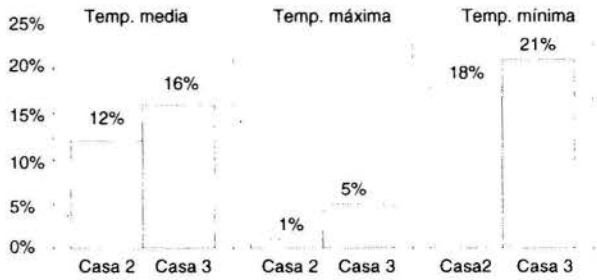


Figura 8A - Aumento de la temperatura interior con relación a la Temperatura exterior (Casas Ventiladas)
casa 2: ventanas en fachada este
casa 3: ventanas en fachada oeste

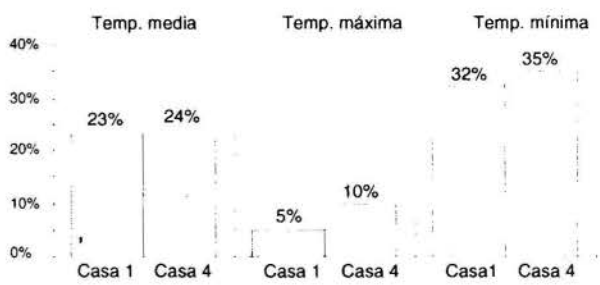


Figura 8B - Aumento de la temperatura interior con relación a la temperatura exterior (Casas no ventiladas).
casa 1: ventanas de en fachada este
casa 4: ventanas en fachada oeste.

Se observa, tanto en las casas ventiladas como en las no ventiladas, un mayor aumento de la temperatura en el ambiente Sala-comedor cuando las ventanas de dicho ambiente están orientadas hacia el Oeste; estas ventanas no sólo no reciben los vientos, sino que dejan penetrar directamente la radiación solar durante las horas de máxima intensidad (comienzos de la tarde); por otro lado, se constató que las fachadas a las que pertenecen estas ventanas, por estar precisamente expuestas al sol, sufren serios aumentos de calor, lo que provoca un incremento adicional de la temperatura interior.

La figura 8B referida a las casas no ventiladas da una idea de la magnitud de este aumento. El calor almacenado en las fachadas se transmite hacia las superficies internas por conducción (flujo de calor en el interior de los cerramientos), y luego al aire interior por convección (flujo de calor entre las superficies y el aire). Si se advierte que estos aumentos de temperatura son mayores que en el caso de los ambientes ventilados, se comprenderá la importancia que tiene sustituir el aire interior por aire más fresco proveniente del exterior: de este modo se enfrían las superficies internas, puesto que el calor intercambiado por convección es proporcional a la velocidad del aire y a la diferencia de temperatura entre el aire y las superficies.

CONCLUSIONES

Los ejemplos de ventilación natural descritos en este texto enseñan la dependencia entre la geometría de una vivienda, su orientación y el flujo de aire en los ambientes internos; asimismo, presentan a la ventilación natural como un medio efectivo para disminuir la temperatura del aire en el interior de las viviendas. La metodología aquí utilizada para apreciar los flujos de aire constituye una alternativa interesante y fácil de ejecutar, estando al alcance de los profesionales de la construcción deseosos de conocer las cualidades ambientales de sus proposiciones. No obstante, la puesta en servicio de un método general mediante el cual sea posible predecir la ventilación natural desde la misma etapa de diseño, requiere de un tratamiento mucho más amplio, donde se conjuguen los conocimientos acumulados en otros países con una propuesta regional basada en mayor número de mediciones, tanto en edificaciones reales como en laboratorio, complementadas con modelos numéricos y/o analíticos de predicción.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

ALLARD F. , HOBAICA M.E. (1993) Concepto de Confort Térmico y Comportamiento Eólico de Edificaciones. Artículo: Revista Tecnología y Construcción nº 9 - IDEC, FAU, UCV

Bernal F. , A. (1983). Atlas Climatológico de Venezuela. Imprenta Universitaria. Universidad Central de Venezuela.

Givonni B. (1978). L´Homme L´Architecture et le Climat . Editions du Moniteur , Paris.

Hobaica M.E. (1992). Validación Experimental de un Modelo de Térmica de las Edificaciones en Clima Tropical Húmedo. Artículo: Revista Tecnología y Construcción nº 7/8 . IDEC, FAU, UCV.

Hobaica M.E. (1992). Definición y Validación Experimental de un Modelo de Térmica de las Edificaciones en Clima Tropical Húmedo. Trabajo de ascenso. IDEC, FAU, UCV.

Hobaica M.E., Cermeno A., Medina M. (1987). Diseño Térmico de Edificaciones en Venezuela. Artículo: Revista Tecnología y Construcción nº 3 . IDEC, FAU, UCV.

Sosa M.E., Rosales L. (1993). Comportamiento Térmico del Constructivo PER-TAB. Informe técnico, IDEC, FAU, UCV.

Sosa M.E., Rosales L. (1994). Comportamiento Térmico del Sistema Constructivo para Viviendas PLYCEM. Informe técnico, IDEC, FAU, UCV.

ABSTRACT

Natural ventilation and it's relation with indoor air temperature: an experimental study

Thermal experiments where carried out in two residential complexes in the city of Barquisimeto, Venezuela. The aim was to study natural ventilation and its relation with indoor air temperature. The procedure consisted in taking measurements of indoor and outdoor air temperatures, wind speed and direction as well as indoor airflow at several points inside the houses. These experiments confirmed that natural ventilation reduces the indoor air temperature and the time-lag between the maximum values of indoor and outdoor air temperatures.

ADVANCED BUILDING PERFORMANCE PREDICTION: AN OVERVIEW OF SOME DEVELOPMENTS IN THE EUROPEAN UNION

ABCM

P A Strachan
Energy Systems Research Unit (ESRU)
Department of Mechanical Engineering
University of Strathclyde, Glasgow G1 1XJ, Scotland

SUMMARY

For over a decade, the European Commission has consistently supported research and development in the area of building performance prediction. The primary rationale has been to promote the reduction of energy costs and environmental pollution, without any corresponding reductions in comfort or air quality. These developments have been undertaken within a large number of multi-national projects: from advanced glazings and photovoltaic facades, through passive solar component testing and design tool integration, to the use of renewable energies. The paper describes the use of state-of-the-art building performance simulation in European research activity, with particular emphasis on research projects in which ESRU have been involved.

INTRODUCTION

In an effort to meet increasingly more stringent demands for energy efficiency and environmental acceptability, the building design community is exploring more innovative approaches. However, these new approaches often entail greater complexity in the interactions between heat, light and fluid flow. In order to predict the building performance of designs which may include passive solar, natural ventilation and daylighting techniques, responsive building energy management systems etc., designers are turning to simulation as a means of modelling a building and thereby evaluating its performance at the design stage.

Within Europe, Design Support Schemes have been established which offer advice to clients on building design issues related to energy and the environment (McElroy 1993). The increased application of simulation as part of this advice is evidence that simulation programs have progressed to a stage where they can be cost effectively applied. In addition, in the UK, the Chartered Institute of Building Services Engineers (CIBSE) has recently commissioned an application manual to provide guidance to members on the selection and appropriate use of simulation programs within the design process.

It is against this prospect of widespread use that the current research effort, supported by both national and European funding, is seeking to evolve more powerful modelling techniques, develop validation methodologies, address performance assessment issues, construct standard information sources, prototype intelligent interfaces and elaborate frameworks for design integration. Some of these developments are discussed in this paper, with details of relevant EC-funded projects currently underway and recently completed.

Many of the projects described involve the use of the ESP-r system, which has been under development at the University of Strathclyde for over 20 years, and which has been adopted by the EC as a reference program for use in building related projects. For this reason, a brief introduction is first given of the capabilities of the program.

THE ESP-r SYSTEM

ESP-r (Clarke 1985) is an advanced simulation environment for the appraisal of building/plant systems in terms of energy, air and moisture flow, electrical power requirements and air quality. It has evolved significantly in recent years under the influence of actual use in practice (Hand and Hensen 1995). The system can be characterised by:

- its research orientation, with the objective to simulate the real world as rigorously as possible while taking into account all building and plant energy and fluid flows and their inter-connections, and
- well documented source code available to the research community within a UNIX environment.

ESP-r employs a finite volume numerical approach in which data describing a problem (in terms of geometry, construction, internal gains etc.) is transformed into an equation-set representing the conservation of energy and mass within constructions, air volumes and plant components. At the core of the simulator are special purpose numerical solvers which are able to process these equations as a function of system topology and control system interactions. Linked to these solvers are the various domain theories for radiant interchange, conduction, fluid flow, convection, casual gains etc. The system is so designed that the installed algorithms can be replaced readily as the state-of-the-art progresses.

Within ESP-r the building- and plant-sides are modelled by the same mathematical approach: as networks of nodes representing discrete regions (of solid materials, air, working fluids, etc.) connected together to represent potential heat and fluid flow streams. Within the simulator, each region type is assigned a 'coefficient generator' which can develop the governing equations at run-time for transmission to the central solvers.

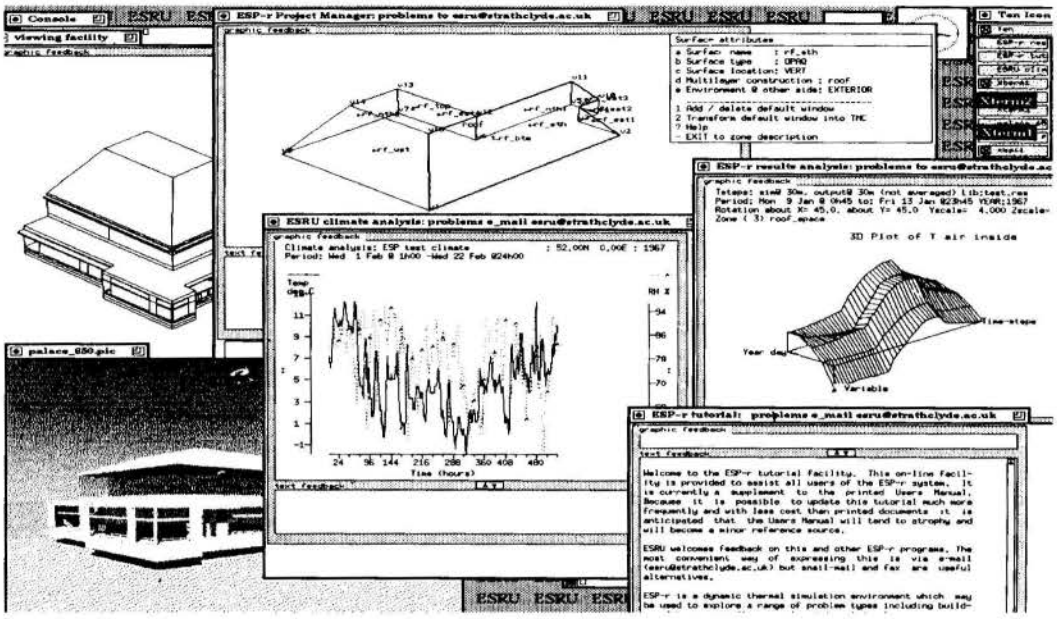


Figure 1: The ESP-r System in Use

In the case of fluid flow, three modelling approaches are offered. At the simplest level, scheduled air change rates can be specified. Alternatively, the flow paths can be represented as a distributed leakage network containing components such as cracks, ducts, pipes, windows, doors, filters, fans, pumps and dampers. At each time-step, an iterative process ensures mass balance throughout the network as a function of the prevailing pressure and temperature conditions and control signals. At a more detailed level it is possible to establish a domain - a single room say - for processing via a computational fluid dynamics approach, and integrate this within an air flow network.

ESP-r, like all simulation programs, is demanding in terms of the type and quantity of data required to describe a problem. To support the process, the system offers two facilities. The first is a Project Manager which coordinates the problem definition session and gives access to the second facility: a set of databases containing prototype constructions, climatic sequences, plant components, occupancy profiles and a set of pre-existing models for use in training. The Project Manager can also give access to external applications - a CAD program for example - and map the resulting data set into the format required by ESP-r.

Figure 1 is indicative of a session with ESP-r where some of these modules are employed to assess the performance of a building. In the upper left, the user has imported a geometry schema from a CAD program into the Project Manager. To the right, the model is being attributed in terms of constructional types, internal heat gains and controls. In the lower left portion the user has exported the model to the lighting program RADIANCE for visualization purposes. In the centre and right, temperatures and relative humidity at several points throughout the building are displayed. Using the results analysis tool, the user can view performance at several levels of granularity, from the whole building case to the energy balance within an individual wall element. Lastly, in the bottom right of the figure, text from the on-line tutorial is displayed.

Different aspects of ESP-r are at present under development at various centres. In undertaking these developments, each site accesses a central source code archive via an FTP server, returning new code at regular intervals. In this way conflicts are avoided and each developer benefits from the developments of others.

The following sections deal with current EC research topics which have significant modelling elements.

INTEGRATED PERFORMANCE

In the northern hemisphere, larger south-facing window areas improve the capture of solar radiation, with the potential to reduce space heating loads and reduce lighting loads through improved daylighting. However, the consequence is an increased potential for overheating. Integrated simulation of both thermal and lighting performance is required to ensure good thermal and lighting comfort in addition to low energy consumption.

Daylight Europe, funded by the EC, is a major collaborative project involving 20 research institutions (Kristensen 1996). Its objective is to communicate daylight research results to architects and engineers within the European building industry, with the focus on the exploitation of daylight to reduce artificial lighting. Of 80 case study buildings being studied, 21 have been selected for detailed monitoring. 12 of these are being evaluated by modelling.

Lighting (RADIANCE) and thermal (ESP-r) analyses are used in a complementary role for in depth analyses for selected case studies. The overall building performance is assessed, firstly to ensure that good

utilisation of daylight is not being achieved at the expense of other performance criteria, such as thermal comfort and overall energy consumption, and secondly, to determine the effects of design variations and extrapolate performance to other design and climate cases.

One interesting innovation in this project is the development of an "integrated performance view (IPV)", derived from the modelling work. This provides, in one summary figure, all pertinent performance assessments to allow the designer to assess the integrated thermal and lighting performance. Figure 2 shows an early version of the IPV based on the the modelling results for one of the selected buildings, the Modane School in France.

A new EC project has just commenced called IMAGE (Implementation of Advanced Glazing in Europe). This project has some similar objectives as the Daylight Europe project, but with the focus on advanced glazing systems such as managed systems (e.g. electrochromics and encapsulated blinds), insulated glazings (e.g. aerogels), and improved framing systems. Three major glass manufacturers are involved in the project. Again the modelling component will focus on integrated performance, and will attempt to characterise potential benefits of these glazings at the full scale, with input for design consultants.

As for all modelling work, support databases are essential. One recently completed project, WIS (Advanced Windows Information System), has involved the construction of a database of thermal and optical characteristics of advanced windows (van Dijk and Bakker 1994).

PHOTOVOLTAIC MODULES IN BUILDINGS

Much interest has recently been generated in the concept of photovoltaic (PV) integrated facades where PV modules are incorporated into the fabric of the building. Overall efficiency and cost effectiveness is improved if use is made of both the electrical and thermal resource from such facades. Cooling of the PV panels by the flow of air within the facade has the additional benefit of improving the electrical efficiency.

Two recent projects illustrate current modelling work associated with predicting the combined electrical and thermal performance. The first was a pilot project involving a demonstration facade on the ELSA building at the EC's Joint Research Centre at Ispra, Italy, which has been fitted with amorphous silicon PV modules with an active area of $544m^2$, giving a rated power output of about 30kW (Figure 3). The work involved detailed experimental work on a test cell fitted with the modules. Measured data from the test cells were compared with predicted data produced by ESP-r, using its new facility for calculating electrical power output from the PV cells and integrating this power extraction within the usual energy balances. The project then involved studying the PV facade performance at full scale (Clarke et al 1995a). The strategy, as with many other projects looking at new building components, is in outline:

i) to use detailed modelling from the laboratory or outdoor test cells to check, or calibrate, the ability of the computer model to predict performance;

ii) to then scale up from the controlled environment of a test cell to real designs typical of the intended application (with a further check against measured data where possible); and finally,

iii) to use the computer model with confidence, to investigate a range of design alternatives and climatic regimes for the particular component under study (Strachan 1993).

The second project, one of the Solar House projects (see following section), was similar in concept. In this case, high efficiency mono-crystalline silicon cells were tested in a solar simulator, in order to determine the effect of temperature on cell efficiency, assess the enhanced efficiency associated with cell cooling and cavity heat recovery, and develop the mathematical model of the PV facade for use in estimating outdoor performance with the ESP-r system (Clarke et al 1996). Table 1 illustrates the large improvement in facade performance possible when combined electrical and thermal efficiencies are considered.

	Week in		
	Winter	Spring	Summer
Insolation (kWh)	26.5	132.2	211.6
Electrical Power (kWh)	3.1	16.3	25.8
Electrical Efficiency (%)	11.7	12.3	12.2
Heat Recovered (kWh)	7.3	42.0	94.6
CHP Efficiency (%)	33.2	44.1	56.9
CO_2 Reduction (kg)	4.3	23.9	34.9

Table 1: Effective seasonal operating efficiencies.

A new project commenced in summer 1996 called PV-Hybrid-PAS. This has the objective of studying a range of PV hybrid components (i.e. using heat recovery and electrical output) throughout Europe. The modelling work will follow the same strategy as outlined above. After calibration, simulations at the real building scale will be undertaken in order to assess the utilisability of the generated electrical/thermal energy, followed by a replication study to determine PV system performance in other European climates. A similar project, HYPRI, is aimed at roof mounted hybrid PV components.

DESIGN EXEMPLARS

The EC is promoting dissemination of solar technologies through the use of design exemplars. A major program is the Solar "House" project which involves the designer-led incorporation of low energy components within European exemplary building designs. The intention is to demonstrate that such components can be harnessed without compromising accepted design principles.

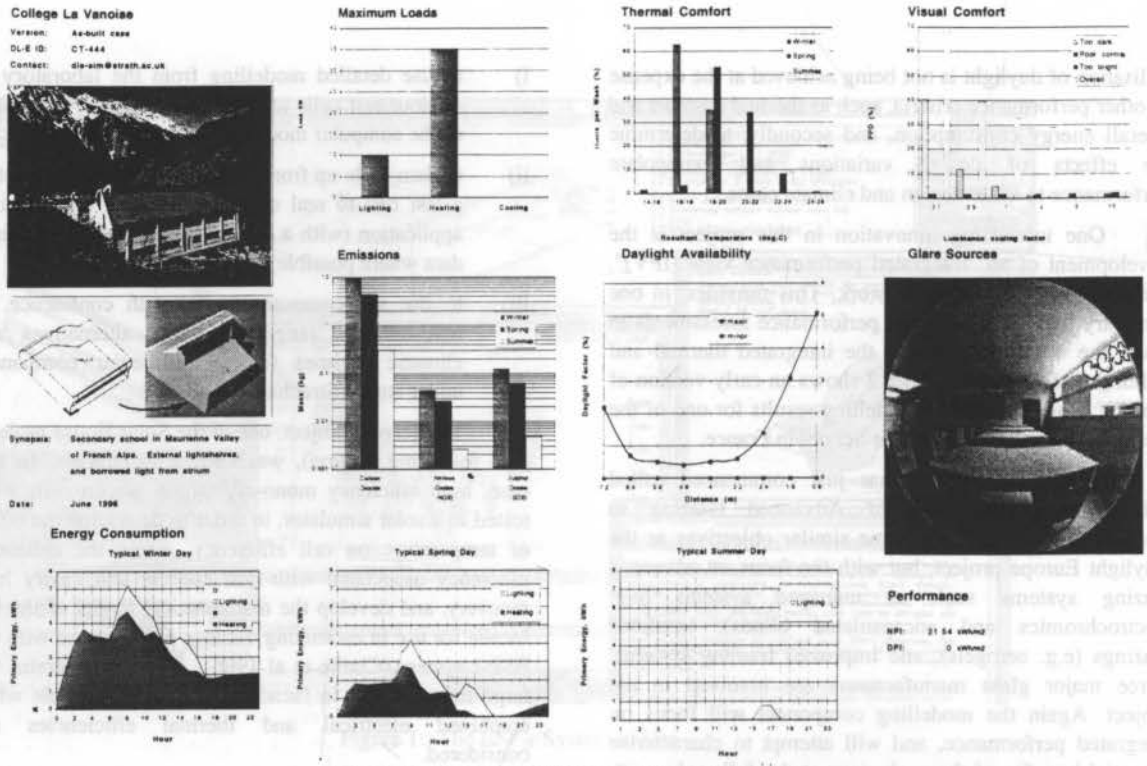


Figure 2: Example of Integrated Performance View

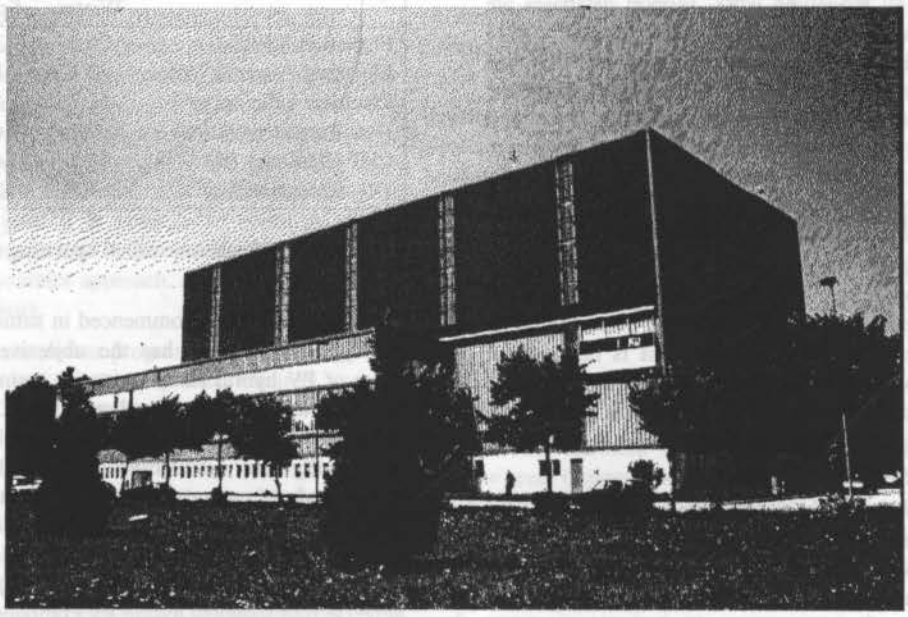


Figure 3: PV Facade, ELSA Building, Ispra, Italy

To assist with component optimisation/integration, and ensure that one performance aspect (e.g. lower electricity costs through the use of photovoltaic facades) is not attained at the expense of another (e.g. increased lighting use because of reduced daylight penetration), a technical support service has been established. This service utilises the ESP-r system to appraise a building's overall energy and environmental performance. The support service is situated at the University of Strathclyde and operates under the direction of the SOLINFO programme (Fitzgerald and Lewis 1993).

PASSIVE COOLING

In Southern Europe, passive cooling is an important technique for energy conservation, particularly in view of the large recent increase in the use of air conditioning (for example, annual purchases of air conditioning equipment increased by 900% in a three year period in Greece at the start of this decade, resulting in peak energy demands switching to the summer period). In response to this, between 1992 and 1995 the EC funded the PASCOOL project with the intention of developing techniques, tools and design guidelines in order to promote passive cooling techniques in buildings

(Santamouris and Argiriou 1993). The modelling group within the project split into four main tasks - solar control, natural ventilation, thermal mass and "PASSPORT+". PASSPORT+ was a program developed within the PASCOOL project focusing on passive cooling techniques, but the algorithms developed within the program were published and made available for other simulation programs. Although the project had many deliverables, of note from the modelling point of view were a program called CPCALC which can calculate pressure coefficients around buildings given various site parameters as input, a detailed reference model for calculating the performance of external slatted blinds, a number of microclimatic data sets, and a database of experimental datasets collected within the project.

Work in the field of ventilation is continuing with new EC projects - NATVENT, which aims to overcome technical barriers to low energy natural ventilation in office-type buildings in moderate and cold climates, and AIOLOS, aimed at wider dissemination of the ventilation strategies investigated within PASCOOL.

VALIDATION

This topic has received substantial attention in recent years, notably within the EC's PASSYS ("PASsive Solar Components and SYStems testing") project (1986 - 1992). The main objectives of the PASSYS project (Wouters and Vandaele 1994) were:

- To develop reliable and affordable procedures for the testing of the thermal and solar characteristics of passive solar (and other) components in a building system.
- To increase confidence in passive solar simulation through validation and further refinements. This work was extended to include the use of energy simulation techniques to extrapolate the experimental findings of a PASSYS test to real design cases and alternative climates.
- To increase confidence in passive solar simplified design through the activity of development and validation.

The two main tools available to achieve these objectives were firstly, a network of high quality test sites throughout Europe, each equipped with 2 to 4 identical test cells, common sensor and data acquisition systems, and a flexible heating/cooling system, and secondly, the simulation program, ESP-r.

The PASSYS validation methodology (Jensen 1993), building upon previous work, considered validation as a multi-step process, comprising the elements of theory and source code checking, analytical testing, inter-program comparisons, sensitivity analysis, and empirical validation. All aspects formed part of the research effort, but with the emphasis on empirical validation. A large effort was expended in closely interlinking simulation modelling and the experimental test cell facilities; the former being used to help in the specification of each experiment and extrapolate experimental results to typical design cases; the latter being used to characterise component performance, provide data for model calibration and support model validation.

The work of PASSYS also addressed the calibration of simulation programs via the techniques of parameter sensitivity assessment, residuals analysis and parameter identification (Clarke et al 1993).

The development of a validation methodology and accreditation procedures are likely to assume a greater importance as simulation-based standards come into force. Initial steps in this direction are being taken at the European level (van de Perre et al 1991).

INTEGRATION OF DESIGN TOOLS

There are two main issues facing the effective integration of simulation (and the technology it is based on) in practice. Firstly, there is a need to put in place a consistent *product model* of a building and its systems from which the disparate design tools can obtain their inputs and return their outputs. This is a non-trivial task, especially if an attempt is made to accommodate the temporal dimension of the design process. It is this issue that was addressed within the EC's COMBINE project (Augenbroe 1995). Essentially, the objective was to evolve an integrated data model (IDM) which can satisfy the needs of a representative set of design tools (for energy analysis, CAD, lighting, costing etc.). The IDM interface is then able to receive from, store and deliver data to the design tools in a manner which ensures that the data are accompanied by their related semantics.

Secondly, given the existence of a suitable product model, the important question of design tool interaction must be addressed. This requires the development of formal frameworks of the design process, and consideration of such aspects as the support of design concurrency, the preservation of a history of transactions, the support of constructive user dialogue, incremental model definition and intelligent defaulting.

One aspect of COMBINE was to explore the form of an intelligent, integrated building design system (IIBDS) which deals with some of these issues. Prototypes, based on an existing intelligent interface prototyping environment, the IFe (Clarke and Mac Randal 1991), were developed to explore the issues involved and the problems to be overcome. At the end of the COMBINE project in 1995, these prototypes were demonstrated to architects and engineers, showing, at least for a well defined "project window" within the design process, how the interaction of the various design tools could be controlled, with the design tools exchanging data with a single project data model.

INTEGRATION OF RENEWABLE ENERGY

To complement projects mentioned above that have the general objective of reducing energy use (and therefore harmful environmental emissions) within buildings, the EC also funds research into how renewable energies may be used to match the energy demand. One such project (Clarke et al 1995b) involves the

development of a decision-support system for use by planners and energy managers engaged in the development of renewable energy resources at the regional level. The objective of the system is to permit the matching of energy demand and renewable supply profiles while imposing appropriate economic, social and environmental constraints. Within the scope of the project, three regions in Europe with different renewable options (Highland Region in Scotland, Vale do Douro Norte Region in Portugal, and Andalusian Region in Spain) are being studied to quantify the local demand and supply potentials, to elaborate information processing strategies and to define environmental and socio-economic assessment criteria.

The project aims to demonstrate that the use of the decision-support system will permit informed decisions regarding opportunities for the exploitation of renewables at both local (autonomous) and strategic levels.

CONCLUSIONS

Many of the large multi-national projects underway in Europe in the field of building performance prediction, and energy conservation in particular, include a significant modelling component. This reflects the move towards simulation becoming integral within the design process. Some of these projects have been included in this paper; other important topics, such as thermal bridge and condensation prediction, have not been covered due to lack of space.

There are still many barriers to the wider uptake of simulation by practitioners, and improvements to the technical basis as well as user interfaces are still the focus of research. However, it is integrated performance assessment and integrated use of design tools which offer the most significant potential for the future.

One of the biggest challenges is to ensure the dissemination of the technology from these research projects. This is now being tackled by an emphasis in EC projects of demonstration and design exemplars, with collaborative working between designers and researchers. At a regional level, Design Support Schemes are being established which can offer advice based on the application of simulation to a client's problem. Organisations such as IBPSA (International Building Performance Simulation Association) also have an important role to play.

REFERENCES

Augenbroe G, 1993, "COMBINE: A Joint European Project towards Integrated Building Design Systems", *Proc Building Systems Automation-Integration '92*, Dallas.

Clarke J A, 1985, "Energy Simulation in Building Design", Adam Hilger Ltd, Bristol and Boston.

Clarke J A and Mac Randal D F, 1991, "An Intelligent Front-End for Computer-Aided Building Design", *Artificial Intelligence in Engineering*, Computational Mechanics Publications, Vol 6, No 1, pp 36-45.

Clarke J A, Strachan P and Pernot C, 1993, "An Approach to the Calibration of Building Energy Simulation Models", *ASHRAE Transactions*, Vol 99 Pt 2.

Clarke J A, Johnstone C M, Strachan P A, Bloem J J and Ossenbrink H, 1995a, "Thermal and Power Modelling of the Photovoltaic Facade on the ELSA Building, Ispra", *Proc. 13th European Photovoltaic Solar Energy Conference*, Nice, pp2191-4.

Clarke J A, Grant A D et al, 1995b, "Integration of Renewable Energies in European Regions", *APAS-RENA Projects Conference*, DGXII, Venice.

Clarke J A, Hand J W, Johnstone C M, Kelly N and Strachan P A, 1996, "The Characterisation of Photovoltaic-Integrated Building Facades Under Realistic Operating Conditions", *Proc. 4th European Conference on Architecture*, Berlin.

Dijk van H A L and Bakker L G, 1994, "Development of a European Advanced Windows Information System (WIS)", *Proc. European Conference on Energy Performance and Indoor Climate in Buildings*, Lyon.

Fitzgerald E and Lewis J O, 1993, "The Solar House - Design Support", *Proc. 3rd European Conference on Architecture* Florence, Italy, pp679-682.

Hand J W and Hensen J L M, 1995, "Recent Experiences and Developments in the Training of Simulationists", *Proc. Building Simulation '95*, Madison, USA, pp346-353.

Jensen S O (Ed), 1993, "The PASSYS Project. Subgroup Model Validation and Development", *Final Report, Parts I and II, 1986-1992* Commission of the European Communities, DGXII.

Kristensen P E, 1996, "Daylight Europe - Joule Project CT94-0282", *Proc. 4th European Conference on Solar Energy in Architecture and Urban Planning*, Berlin.

McElroy L, 1993, "The Energy Design Advisory Service as an aid towards a new working frame", *Proc. 3rd European Conference on Architecture* Florence, Italy, pp631-634.

Perre van de R, Jensen S O, Bloomfield D and Agnoletto L, 1991, "Simulation-Based Environmental Building Performance Standards - A Case Study: European Harmonization", *Proc International Workshop on Computers and Building Standards*, VTT, Espoo, Finland.

Santamouris M and Argiriou A, 1993, "The CEC Project PASCOOL", *Proc. 3rd European Conference on Architecture* Florence, Italy, pp88-90.

Strachan P, 1993, "Procedures for Scaling and Replication by Simulation", *Proc. Building Simulation '93*, Adelaide, pp343-9.

Wouters P and Vandaele L, 1994, *The PASSYS Services: Summary Report*, European Commission Publication No EUR 15113 EN.

ACKNOWLEDGEMENTS

Many thanks are due to colleagues within the ESRU group, in particular Joe Clarke, Jon Hand and Jan Hensen. These, together with many other colleagues throughout Europe, have enabled the modelling developments and successful conclusion of the projects described in this paper.

ABCM

EVALUACION DEL SINDROME DE EDIFICIO ENFERMO APLICANDO UN MODELO FACTORIAL FRACCIONADO SATURADO

Luis Miguel Sarache Belandria
Escuela de Ingeniería Mecánica. Departamento de Tecnología y Diseño. Facultad de Ingeniería
Universidad de Los Andes - Mérida Edo. Mérida - Venezuela.

RESUMEN

Cuando se quiere evaluar una edificación en función de la calidad del aire, con las mediciones experimentales de CO_2 como un indicativo del sindrome de edificio enfermo SEE, la capacidad de evaluar cual o cuales efectos son predominantes para que esto suceda, se puede obtener mediante la utilización de técnicas estadisticas basadas en la experimentación, que hacen posible un análisis amplio, sencillo y de alta validez sobre los efectos y sus consecuencias, con un número reducido de pruebas, utilizando adecuadamente un Modelo Factorial Fraccionado Saturado, en poco tiempo y bajo costo.

INTRODUCCION

Se hace necesario profundizar los conocimientos sobre la calidad del aire interior en edificaciones, no solo por el esfuerzo puesto de manifiesto por arquitectos y diseñadores en la construcción de edificaciones herméticas con el aumento del aire recirculado, disminuyendo los costos en aire acondicionado: este interes por conocer los factores que inciden en la calidad del aire se manifiesta en diversos simposios sobre le tema; 50 Conferencia Internacional (1990), hay un esfuerzo dado por los investigadores ambientalistas en el desarrollo de métodos más exactos y sensibles para identificar sustancias como el radon y otros compuestos orgánicos atrapados en edificaciones herméticas; mediante este trabajo se presenta un modelo basado en los Métodos Estadísticas de los Diseños Factoriales Fraccionados Saturados y Sobredoblados.

FASE PRE-DISEÑO

En esta fase el elemento a ser estudiado es la cantidad del Dioxido de Carbono CO_2, presente en una edificación, tomando este valor como un indicador de la efectividad de los sistemas de ventilación tal como lo plantea Sterling (1991), utilizando para ello los datos aportados por un equipo análizador de gases portátil, a continuación se presentan los factores considerados.

Tabla 1. Presentación del Diseño Factorial 2^5

VARIABLE A ESTUDIAR		Niveles BAJO	ALTO	Código	
Ubicación de Oficinas	[1]	Internas	Externas	-	+
Nivel del Piso	[2]	Primero	Ultimo	-	+
Servicio al Público	[3]	Si	No	-	+
Temperatura °C	[4]	19	22	-	+
Tipo de Ambiente	[5]	Abierto	Cerrado	-	+

Se debe realizar un estudio aleatorio en la edificación en la cual se tomen muestras como mínimo dos por sitio y por área para luego efectuar la media de las mediciones en los ambientes, a distintas horas del dia; se presentan cinco variables para el estudio de las cuales 4 de ellas son cualitativas y otra cuantitativa como es la temperatura general de ambiente; se estiman $2^5 = 32$ pruebas y sus respectivas réplicas, por los amabientes y a distintas horas, en todo caso no significan menos de 640 pruebas y con la aplicación de estos métodos es posible reducirla a la mitad. Para el experimento se deben considerar como constantes, el flujo de personas atendidas, la cantidad de personal fijo, el día de la semama, mes y servicio que presta, equipo utilizado y distribución de la ventilación, etc.

MODELO FACTORIAL FRACCIONADO SATURADO

En esta sección se muestra la utilidad del patrón de confusión, tal como lo establece Box (1978), en ese estudio las variables de interés son confundidas con los efectos de las interacciones de bajo y alto orden ya que los mismos se consideran insignificantes y lo realmente medible es el efecto principal de las variables, el término sarturado se refiere al hecho de llevar a su mínima expresión el número de variables a estudiar con 2 niveles y 5 variables a estudiar mediante el análisis de 3 de ellas, utilizando el modelo $2^{5-2} = 2^3$, es decir, se requieren 8 pruebas y sus réplicas para evaluar el efecto de las 5 variables.

Para un DFF 2^{K-P}, el valor de P indicará el número de generadores, a la vez el valor 2^P indica el número total de combinaciones posibles dados por los generadores menos el valor promedio, en un 2^{5-2} existen 2 generadores y 3 combinaciones dadas por el patrón de confusión. Para este modelo se presentan dos generadores de las columnas de interacción de factores.

Primer Generador I = 124

Segundo Generador I = 135

En la Tabla 2, se hace una representación de los valores de las columnas de signos de las variables [3] y [5] y como el producto de las mismas genera una columna de signos idéntica

en secuencia con la obtenida por el valor de la variable [1], tal como lo plantea Cheng (1980).

Tabla 2. Valores demostrativos del patrón de confusión.

Variable Principal (GENERADOR) [1]	Patrón de Confusión de las variable [3] y [5] con la variable [1] [3]	[5]	Signos generados [35]
-	-	+	-
+	-	-	+
-	-	+	-
+	-	-	+

Generadores I = 124 = 135 = 236 (1)

Si en total se requieren 3 combinaciones y existen 2, faltan por encontrar 1 combinación, tal como los presenta Anderson (1980):

I = 124 x 135 = 112345 = I2345 = 2345

En resumen se tienen los siguientes valores:

I = 124 = 135 = 2345

En los Diseños Factoriales Fraccionados, tiene mucha importancia aplicar el criterio de redundancia dado por Box (1961), para hallar el efecto de las variables individuales, en el cual no se consideran los efectos de interacción de alto orden ya que más de tres variables no se estiman significativas para el proceso, los valores de los efectos principales y con interacción poseen magnitudes muy superiores, entonces de los 4 valores de combinaciones quedan:

I = 124 = 135

La Tabla 3, muestra los resultados de las mediciones de CO_2 hipotéticas para un Diseño Factorial Fraccionado Saturado y las columnas del patrón de confusión obtenida.

Tabla 3. Respuesta con un Diseño Factorial 2^{5-2}

CORRIDA	DISEÑO DE LA MATRIZ $2^{5-2} = 2^3$					
Aleatoria	Variables			4	5	CO_2
	1	2	3	12	13	ppm
1	-	-	-	+	+	635
2	+	-	-	-	-	695
3	-	+	-	-	+	603
4	+	+	-	+	-	738
5	-	-	+	+	-	610
6	+	-	+	-	+	711
7	-	+	+	-	-	695
8	+	+	+	+	+	781

Una vez realizadas las ocho pruebas y sus respectivas réplicas en función de la medición de las ppm de CO_2 presentes en el aire, estos resultados medidos son promediados y tabulados como lo muestra la tabla. Se realiza la experimentación del Diseño Factorial Fraccionado Saturado Sobredoblado tal como se aprecia en la Tabla 4, que representa la función espejo de las pruebas anteriores y cuyo objetivo es poder mediante la utilización de dos matrices separar los efectos principales de los efectos de interacción de dos o tres factores, necesaria para un análisis real de la situación, siguiendo los criterios de Box y Hunter (1961).

Tabla 4. Diseño y resultados de un Diseño Factorial Fracionado Saturado Sobredoblado.

CORRIDA	MATRIZ SOBREDOBLADA $2^{5-2} = 2^3$					
Aleatoria	Variables			4	5	CO_2
	1	2	3	12	13	ppm
1	+	+	+	-	-	756
2	-	+	+	+	+	678
3	+	-	+	+	-	745
4	-	-	+	-	+	773
5	+	+	-	-	+	683
6	-	+	-	+	-	724
7	+	-	-	+	+	697
8	-	-	-	-	-	765

Si lo que se pretende es conseguir el efecto individual de cada variable es necesario establecer cuales de los valores de las combinaciones acompañan al efecto individual, para ello se toman todas las combinaciones que estén asociadas a éste, como se muestra a continuación para la variable ubicación de oficinas [1]:

I = 124 = 135

Efecto [1] = [1 + 24 + 35] (2)

Los efectos son presentados como la matriz **A**:

Efecto [1] = [1 + 24 + 35]
Efecto [2] = [2 + 14]
Efecto [3] = [3 + 15]
Efecto [4] = [4 + 12]
Efecto [5] = [5 + 13]

Para la Tabla 4 en la cual se tiene el efecto espejo dado por un Diseño Factorial Fraccionado Saturado Sobredoblado, los efectos son los presentados como la matriz **B**:

Efecto [1] = [1 – 24 – 35]
Efecto [2] = [2 – 14]
Efecto [3] = [3 – 15]
Efecto [4] = [4 – 12]
Efecto [5] = [5 – 13]

Para calcular el efecto de cada variable basta utilizar la ecuación planteada por Box y Hunter (1978):

Efecto [x] = 2/N Σ[ppm CO_2 + o – de la columna] (3)

Ejemplo: cálculo para el efecto [1] de los resultados de la Tabla 3, aplicando la ecuación (3) y considerando N = 8 pruebas.
Efecto [1] = 2/8 Σ [– 635 + 695 – 603 + 738 – 610 + 711 – 695 + 781] = 95,5 ppm

De esta misma forma se calculan los efectos de las demás variables, como se muestra en las matrices **A** y **B**.

Efecto [1] = [1 + 24 + 35] = 95,5 ppm
Efecto [2] = [2 + 14] = 41,5 ppm
Efecto [3] = [3 + 15] = 31,5 ppm
Efecto [4] = [4 + 12] = 15,0 ppm
Efecto [5] = [5 + 13] = -2,0 ppm

Efecto [1] = [1 – 24 – 35] = – 14,75 ppm
Efecto [2] = [2 – 14] = – 34,75 ppm
Efecto [3] = [3 – 15] = 20,75 ppm
Efecto [4] = [4 – 12] = 33,25 ppm
Efecto [5] = [5 – 13] = 39,75 ppm

Seguidamente se procede a separar los efectos principales de los efectos de interacción de dos variables, realizando el promedio de la suma y la diferencia de estas dos matrices.

Efecto Individual de Variables = [½ (**A** + **B**)] (4)

Cuando se realiza el promedio de las diferencias se obtiene el valor de las variables de interacción.

Efecto de Interacción de Variables = [½ (**A** – **B**)] (5)

Tabla 5. Valores calculados de los efectos individuales como de interacción una de las dos matrices.

½ (**A** + **B**) ppm	½ (**A** – **B**) pmm
Efecto [1] = 40,3	Efecto [24+35] = 55,1
Efecto [2] = 3,3	Efecto [14] = 38,1
Efecto [3] = 26,1	Efecto [15] = 5,4
Efecto [4] = 74,0	Efecto [12] = – 9,1
Efecto [5] = 18,8	Efecto [13] = –20,9

Para la significancia se calcula la desviación permisible, en este caso se realizaron dos réplicas de cada prueba y utilizando por Montgomery (1986), se tiene:

$$S^2 = \sum_{1}^{N} [X_i - X \text{ (Media)}]^2 / 2g \quad (6)$$

X (Media) = 638,5 ppm S^2 = 1733,25 ppm ^{2}

La varianza del efecto es la siguiente:

$$\sigma = [S^2 / 2]^{1/2} \quad (7)$$

$$\sigma = [1733,25 / 2]^{1/2} = 29,43 \text{ ppm}$$

Como resultado en la Tabla 6, se compara el efecto de las variables con la desviación presente en el experimento y de allí se toma aquellos valores que se consideran significativos al ser superiores a dos veces el valor de la desviación, dado que si la probabilidad de ocurrencia es muy baja y se hace presente, es un indicio para considerar el peso de la variable como significativa.

Tabla 6. Resultados de variables significativas.

Variables Principales	Efectos ± 2 Desviación
Efecto [1]	74,0 ppm > ± 2*29,4 ppm
Variables Interacción	Efectos ± 2 Desviación
Efecto [13]	–20,9 ppm ± 2*29,4 ppm

DISCUSION

Una vez realizado los cálculos respectivos y tabulados los resultados, haciendo la separación de las variables significativas basado en que se consideran significativas si su efecto es superior a dos veces el valor de la desviación sea un efecto individual o en interacción, se determina en este caso que la variable ubicación de oficinas es el factor más determinante en la concentración de CO_2 y para este caso igualmente se aprecia que los valores del efecto de interacción 13, ubicación de oficinas y prestación de servicio al público aun cuando no corresponden con el nivel de significancia, sin embargo, se toman estos valores como ejemplo por ser los que tienden a bajar el nivel de ppm de CO_2, adicionalmente se mantiene como criterio, que si los efectos de interacción resultan significativos no hace falta hacer el análisis de los efectos individuales de esa interacción ya que esta evidencia es más fuerte e implica hacer un análisis en función de la superficie de respuesta que de ella se genera, en términos de un diagrama de dos vías, solución práctica y sencilla para un análisis, independientemente de que las variables sea cualitativas o cuantitativas.

Análisis de los efectos de interacción. Para el análisis es necesario estructurar una tabla como la mostrada a continuación, tomando los valores experimentales de las tablas 3 y 4, y con ellos realizar los cálculos para definir la superficie de respuesta generada mediante un diagrama de dos vías indicando las tendencias del mismo.

Tabla 7. Representación de la interacción 13.

INTERACCION			CORRIDAS				MEDIA
ORDEN	1	3	1	2	3	4	CO_2
1	-	-	635	603	768	724	682,50
2	+	-	695	738	697	683	703,25
3	-	+	610	695	773	678	689,00
4	+	+	711	781	745	756	748,25

Según como se presentan los resultados se puede realizar el diagrama de dos vías a fin de determinar las tendencias de crecimiento o decrecimiento de las ppm de CO_2, orientando en forma sencilla el análisis para la toma de decisiones; al apreciar

la figura a continuación se presentan las tendencias de crecimiento.

Ubicación de las Oficinas	Variación en las dos direcciones de los niveles de ppm de CO_2
Internas	+ 59,25 689,00 → 748,25
⇑	↑ + 6,5 ↑ + 45
Externas	682,50 → 703,25 + 20,75
Atención al Público	SI ⇒ NO

Figura 1. Diagrama de dos vías entre el factor Ubicación de Oficinas y Prestación de Servicio.

Si se considera la variable ubicación de las oficinas se tiene que en la medida en que las mismas tengan ventilación o acceso externo poseen menor cantidad de ppm de CO_2, de igual manera se aprecia que al tener oficinas que prestan atención al público sus niveles son mayores que si no lo hicieran, la tendencia central es que la condición más severa ocurre con la ubicación de oficinas internas y para atención del público, lo que representa realizar una acción para modificar la edificación y disminuir los niveles de CO_2, como se aprecia la utilización de los métodos de Diseños Factoriales Fraccionados son de suma importancia no solo para el análisis sino para la toda de decisiones como es mostrado con este ejemplo sencillo e hipotético sobre los efectos de medir la cantidad de CO_2, presente en ambientes interiores y su efecto sobre la calidad del aire.

El estudio anterior puede ser utilizado para diagnosticar que se esta en presencia de una inadecuada ventilación, sea por: insuficiente suministro de aire fresco, pobreza en la distribución del aire, pobre control de temperatura, inadecuado diseño, modificaciones inapropiadas, carencia de mantenimiento o falta de conocimiento en el sistema de operación tal como lo presenta Rajhaus (1983), como se trata de evaluar la presencia del SEE (Síndrome del Edificio Enfermo), es indispensable solicitar información a: personal de mantenimiento, ocupantes y usuarios, inspecciones visuales, evaluaciones de equipos, estudio de los diseños originales, datos operativos incluyendo el estado de serpentines, cámaras de ventilación, etc., tal como indica Turner (1990), muchos de los problemas atribuibles al SEE, han revelado que no pueden ser atribuibles a un solo efecto como la presencia del CO_2, ya que se presentan bacterias, nicotina, hongos, gases y partículas que se encuentran en suspensión y las responsabilidades de diseñar, ocupar y mantener un edificio, tal como lo plantea Robertson (1990). La aplicación de los Diseños Factoriales Fraccionados (FF designs), presentan la ventaja de poder hacer el análisis de muchos factores con un número reducido de ellos, con un esfuerzo numérico sencillo comparado con los métodos tradicionales, sin embargo, la validez se basa en los estudios y discusiones de los aspectos matemáticos planteados por Shirakura (1993) para dos y tres niveles; lo importante es la optimización sea esta global o parcial, tal como lo establece Nishii (1993).

REFERENCIAS

Anderson D. A. and A.M. Thomas, Weakly resolvable IV. 3 search designs for the P^n factorial experiment, J. Statistics. Plan. Inference 4 , pp. 299-312. 1980.

Atkinson, A. C., Recent developments in the methods of optimum and related experimental designs, Internat. Statistics. Rev. 56, pp. 99-115. 1988.

Box, G. E. P., W.S. Hunter and J. S. Hunter, Statistics for Experiments, Wiley & Sons, New York, 1978.

Box, G. E. P. and J. S. Hunter, The 2^{K-P} Fractional Factorial Designs, Parts II, Technometrics 3, pp. 311-351; 449-458. 1961.

Cheng, C. S. Optimality of some weighing and 2^n fractional factorial designs, Ann. Statistics 8, pp. 436-446, 1980.

Montgomery, D., Diseño y Análisis de Experimentos, Iberoamericana, c.v., Mexico, 1991.

Nishii, R., Optimality of experimental designs, Discrete Mathematics 116 pp. 209-225, 1993.

Rajhaus, G. Indoor Air Quality and CO_2 Levels. Occupational Health in Ontario, pp. 160-167, 1987.

Robertson, G. Energy Efficiency and Health, A Workable Compromise. Council on tall Builldings and Urban Habitad Conference, Hong Kong, pp. 5-9, 1990.

Shirakura, T., Fractional factorial designs of two and three levels, Discrete Mathematics 116, pp. 99-135, 1993.

Sterling, E. and C. Collett. The Impact of Ventilation on Indoor Air Quality and Human Health and Confort. I Congreso Iberoamericano de Aire Acondicionado y Refrigeración, pp. 1-20, Colombia, 1991.

The Fifth International Conference on Indoor Air Quality and Climate, Toronto, Canada, 1990.

Turner, S. and P. Binnie. An IAQ Survey of the 26 Swiss Office Builldengs, Env. Tech. Vol II, pp. 303-314. Selper Ltd, 1990.

ABSTRACT.

In this paper, we show a Method Fractional Factorial Designs (FFD) of the 2^{K-P} type established by Box, Shirakura and other, we mainly discuss of theses designs the practical importance: they make it possible to give experiments with relativery many factors and few assemblies at a time, and althrough they can explore a wide region of these factors and theirs effects over " sick building syndrome ", these method es very important for the solution for problems associated with the SBS.

TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA A TRAVES DE UNA PUERTA ABIERTA

Adelqui Fissore Sch. Reinaldo Bareyns R.
Departamento de Ingeniería Mecánica
Universidad de Concepción
Casilla 53-C - Concepción - Chile

RESUMEN

El presente artículo presenta un modelo matemático para calcular el flujo de calor y materia, que se produce por convección natural a través de una puerta abierta, que separa dos locales a diferentes temperaturas. Además de la convección natural, el modelo considera la existencia de gradientes de temperaturas en ambos recintos y algún sistema de ventilación mecánica. La teoría se compara con mediciones realizadas en el laboratorio, a escala 1:1, y se obtienen los coeficientes empíricos del modelo.

INTRODUCCION

En Chile, las viviendas de estrato social medio y bajo generalmente no disponen de sistemas de acondicionamiento ambiental adecuados, y en la mayoría de los casos, sólo disponen de uno o más calefactores localizados. Se piensa que en estos casos, mediante un buen diseño del punto de vista térmico de las viviendas, se podrían mejorar bastante las condiciones térmicas y de contaminación interior, optimizando además el uso de la energía. Este diseño se realiza mediante un análisis basado en el uso de programas de simulación térmica detallada de edificios en régimen transiente.

Dadas las características indicadas anteriormente, existen diferencias importantes de temperatura entre los diferentes locales de la vivienda. En estos casos, el flujo de calor y materia que atraviesa las puertas abiertas entre los diferentes recintos, es preponderante en el balance global de éstos. Normalmente, ni este efecto, ni el de las infiltraciones, son considerados en forma eficiente en los programas de simulación existentes.

Debido a lo anterior, se ha creado un modelo, que permite calcular las infiltraciones y movimientos de aire en el interior de una vivienda. Para crear parte de este modelo, se ha debido elaborar un modelo de cálculo para la transferencia de calor y materia a través de una puerta abierta.

El problema de transferencia de calor y materia a través de la puerta abierta es bastante complejo, ya que debido a la diferencia de temperaturas, se superpone una recirculación por diferencia de densidades, al problema de circulación por diferencia de presiones. A pesar de ésto, existen en la literatura algunos modelos relativamente simples, basados en el teorema de Bernoulli, que permiten calcular este flujo (Allard et Utsumi 1992). También existen otros modelos basados en los parámetros usuales de transferencia de calor por convección (Riffat 1989, Santamouris et al 1995). En los trabajos basados en el teorema de bernoulli, aunque algunos autores presentan los modelos con pocas simplificaciones (Allard et Utsumi 1992), no se llega a una aplicación práctica de éstos. En efecto, la mayoría de las aplicaciones prácticas, considera sólo modelos sin estratificación térmica y sin sistemas de ventilación mecánicos.

En el presente artículo, se estudia a nivel de aplicación, diferentes variaciones del modelo basado en el teorema de Bernoulli. Dichas variaciones, están relacionadas con la complejidad del modelo. Adicionalmente, este análisis teórico se complementa con resultados de mediciones en laboratorio en tamaño real.

MODELO GENERAL DE CALCULO

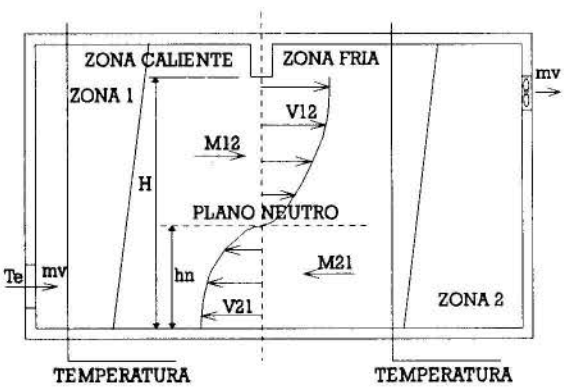


Figura 1. Esquema del problema.

Cálculo del Flujo de Aire. El modelo que se describe en las siguientes páginas, se basa en la ecuación de bernoulli, y se aplica sólo en los casos en que para cualquier altura, siempre la temperatura de uno de los recintos (que llamaremos recinto caliente) es superior a la temperatura del otro recinto (recinto frío). Considérese además, que existe un gradiente lineal de densidades en cada lado de la apertura, dado por la ecuación 1 (ver Figura 1).

$$\rho_1 = \rho_{01} + b_1 Z \ , \qquad \rho_2 = \rho_{02} + b_2 Z \qquad (1)$$

donde b_1 y b_2 son constantes y Z es la altura medida desde el piso.

Aplicando el teorema de bernoulli se obtiene la ecuación 2, donde V corresponde a las velocidades y P a las presiones.

Si en la zona no perturbada $V1 \approx 0$ y utilizando la hipótesis de Bousinesq, que indica que la densidad se considera como constante, e igual a una densidad promedio (que se designará sin sub índice), excepto para las diferencias de densidades, la

ecuación de bernoulli queda exprasada por la ecuación 3:

$$\frac{V_1^2(Z)}{2} + \frac{P_1(Z)}{\rho_1} = \frac{V_2^2(z)}{2} + \frac{P_2(z)}{\rho_2} \qquad (2)$$

$$V_2(Z) \approx \sqrt{2\frac{P_1(Z)-P_2(Z)}{\rho}} \qquad (3)$$

La ecuacion 3 es en el caso ideal. Para tener en cuenta el caso real, se multiplica la ecuación por un factor empírico k'(Z), que en toda generalidad es función de la altura Z. Con ésto, la ecuación queda:

$$V_2(Z) = k'(Z)\sqrt{2\frac{P_1(Z)-P_2(Z)}{\rho}} \qquad (4)$$

Una recomendación práctica para los cálculos donde se incluye la raíz cuadrada de la diferencia de presión, es tratarla en valor absoluto, multiplicando el resultado por +1 ó -1 según corresponda. Esto es:

$$V_2(Z) = k'(Z)\, S\sqrt{2\,\frac{|P_1(Z)-P_2(Z)|}{\rho}} \qquad (5)$$

donde S es la función "signo" que se calcula mediante la ecuación 6.

$$S = \frac{|P_1(Z) - P_2(Z)|}{P_1(Z) - P_2(Z)} \qquad (6)$$

El flujo másico (m_{1-2}) entre la zona neutra (hn) y la parte superior de la puerta (H), está dado por la ecuación 7, donde W es el ancho de la abertura.

$$m_{1-2} = W\,\rho \int_{hn}^{H} V_{1-2}(Z)dz \qquad (7)$$

Según la formulación clásica del llamado "efecto chimenea", la presión en la zona 1 a una cierta altura z, queda dada por la ecuación 8, donde P_n es la presión en la zona neutra y g la aceleración gravitacional.

$$P_1(Z) = P_n - g\int_{hn}^{Z}(\rho_{01} - b_1 Z)\,dz \qquad (8)$$

Escribiendo en forma análoga una ecuación para la presión en la zona 2, y resolviendo las integrales, se obtiene la siguiente expresión para la diferencia de presiones entre las zonas:

$$P_1(Z)-P_2(Z) = \Delta P(Z) \qquad (9)$$

$$\Delta P(Z) = g(\Delta\rho_0)(Z-hn) + \frac{g}{2}(b_1-b_2)(Z^2-hn^2) \qquad (10)$$

$$con, \quad \Delta\rho_0 = (\rho_{02}-\rho_{01}) \qquad (11)$$

Reemplazando la ecuación 10 en la ecuación 5, y ésta en la ecuación 7, se obtiene:

$$m_{1-2} = W\,k\sqrt{2\,\rho}\;S\int_{hn}^{H}\sqrt{|\,\Delta P(Z)\,|}\,dz \qquad (12)$$

Notar que el coeficiente k'(Z) pasó ahora a un coeficiente k. Este es un coeficiente que considera el efecto promedio sobre toda la puerta, y no el efecto local como en el caso de k'. Muchos autores llaman a este coeficiente k: coeficiente de descarga, similar al coeficiente de descarga de un flujo a través de un orificio. Sin embargo, esta denominación induce a confusiones, ya que en la práctica, k considera no sólo este efecto, sino que varios otros más, y más importantes. Debido a ésto, se prefiere llamarlo simplemente coeficiente empírico de flujo.

Una ecuación similar a ésta, se obtiene para calcular el flujo que pasa bajo la zona neutra desde la zona 2 a la zona 1.

$$m_{2-1} = W\,k\sqrt{2\,\rho}\;S\int_{o}^{hn}\sqrt{|\,\Delta P(Z)\,|}\,dz \qquad (13)$$

Las ecuaciones 12 y 13 no tienen solución analítica, y deben resolverse numéricamente.

La posición del plano neutro se obtiene de tal forma que se verifique la ecuación 14, donde m_v es el flujo extraído por el ventilador (ver Figura 1).

$$m_{1-2} + m_{2-1} + m_v = 0 \qquad (14)$$

La solución de este modelo es relativamente compleja, ya que se debe ir modificando el valor de hn, luego resolver las ecuaciones 12 y 13 en forma numérica, hasta que se cumpla la ecuación 14.

Cálculo del Flujo de Calor. Según la Figura 1, la pérdida o ganancia neta de calor de cada una de las zonas queda expresada por:

$$Q_{neto1} = -Q_{1-2} - Q_{2-1} + mv\,c_p\,T_{ext} \qquad (15)$$

$$Q_{neto2} = Q_{2-1} + Q_{1-2} - m_v\,c_p\,T* \qquad (16)$$

donde, c_p es la capacidad calorífica del aire y T* la temperatura a la altura del extractor de aire.

$$Q_{1-2} = \int_{h_n}^{H} m_{1-2}\,(Z)\,c_p\,T_1(Z) \qquad (17)$$

Los gradientes de densidades se pueden reemplazar por gradientes de temperaturas, que también son aproximadamente lineales, según se indica en la ecuación 18, donde a_1 y a_2 son constantes.

$$T_1 = T_{01} + a_1 Z \quad y \quad T_2 = T_{02} + a_2 Z \tag{18}$$

Luego, Q_{1-2} se puede escribir como:

$$Q_{1-2} = c_p W S \int_{hn}^{H} k'(Z)(T_{01} + a_1 Z)\sqrt{2\rho\,|\Delta P(Z)|}\,dz \tag{19}$$

Normalmente, no se conoce k'(Z) local, sino que se conoce el valor de k global. Luego, para efectos del cálculo del Q, se considerara k'(Z) = cte = K. Como el hecho de tomar el valor de k' promedio y sacarlo fuera de la integral induce a un nuevo error, se define una nueva constante empírica Kq, que tiene en cuenta estos errores y otros errores del método relacionados con la parte térmica. Con ésto, la ecuación queda:

$$Q_{1-2} = c_p W K Kq S \int_{hn}^{H} (T_{01} + a_1 Z)\sqrt{2\rho\,|\Delta P(Z)|}\,dz \tag{20}$$

Análogamente, para el Q_{2-1} se tiene:

$$Q_{2-1} = c_p W K Kq S \int_{0}^{hn} (T_{02} + a_2 Z)\sqrt{2\rho\,|\Delta P(Z)|}\,dz \tag{21}$$

La ecuaciones para el flujo de calor deben resolverse también por métodos numéricos.

SOLUCION PARA TEMPERATURAS HOMOGENEAS

Si no hay gradientes de temperaturas verticales en ninguna de las zonas, es decir,

$$a_1 = a_2 = b_1 = b_2 = 0 \tag{22}$$

el flujo másico queda expresado por :

$$m_{1-2} = k\,W\sqrt{2\,\rho\,\Delta\rho}\int_{hn}^{H}(Z-hn)^{1/2}\,dz \tag{23}$$

$$donde, \quad \Delta\rho = \rho_2 - \rho_1 \tag{24}$$

Resolviendo la integral se obtiene:

$$m_{1-2} = 0.943\,k\,W\sqrt{g\,\rho\,\Delta\rho}\,(H-hn)^{3/2} \tag{25}$$

análogamente,

$$m_{2-1} = -\,0.943\,k\,W\sqrt{g\,\rho\,\Delta\rho}\,(hn)^{3/2} \tag{26}$$

La posición de la zona neutra se debe encontrar considerando:

$$m_{1-2} + m_{2-1} + mv = 0 \tag{27}$$

Reemplazando las ecuaciones 25 y 26 en la ecuación 27 y resolviendo mediante algún método numérico, se puede encontrar la posición de la zona neutra.

Los flujos de calor se obtienen mediante las ecuaciones 15 y 16, donde

$$Q_{1-2} = m_{1-2}\,c_p\,T_1 \quad y \quad Q_{2-1} = m_{2-1}\,c_p\,T_2 \tag{28}$$

Solución para Temperaturas Homogéneas Sin Extractor. Como no hay extractor de aire (m_v=0), igualando la masa que pasa por la parte superior con la que pasa por la parte inferior, se puede calcular el valor de hn, el que resulta:

$$hn = \frac{H}{2} \tag{29}$$

Si se considera el aire como gas perfecto, se pueden reemplazar las densidades por temperaturas, y si además se reemplaza el valor de hn por H/2 se tiene:

$$m = \frac{k\,H\,W\,\rho}{3}\sqrt{\frac{g\,\Delta T\,H}{\overline{T}}} \tag{30}$$

$$donde: \quad \Delta T = T_1 - T_2\,, \quad \overline{T} = \frac{T_1 + T_2}{2} \quad [K] \tag{31}$$

El flujo de calor neto que atraviesa la abertura se puede calcular directamente como:

$$Q = K_q\,m\,c_p\,\Delta T \tag{32}$$

MODELO SIMPLIFICADO PARA SISTEMAS ESTRATIFICADOS

Inicialmente, se hizo un análisis para un sistema estratificado, el que arroja como resultados expresiones bastante complejas de resolver. Lo que se presenta en las próximas líneas, es un modelo simplificado para un sistema estratificado, con la finalidad de disminuir la complejidad de los cálculos y entregar expresiones más simples.

Se puede demostrar que si los gradientes son iguales en ambos recintos (es decir $a_1=a_2$ ó $b_1=b_2$), no se comete ningún error en calcular el flujo mediante la misma expresión que para el caso sin estratificación, reemplazando las densidades de los locales por las densidades medias entre el nivel de Z=0 y Z=H. Esto es:

$$m_{1-2} = 0.943\,k\,W\sqrt{g\,\rho\,\overline{\Delta\rho}}\,(H-hn)^{3/2} \tag{33}$$

$$m_{2-1} = -\,0.943\,k\,W\sqrt{g\,\rho\,\overline{\Delta\rho}}\,(hn)^{3/2} \tag{34}$$

$$m_{1-2} + m_{2-1} + mv = 0 \tag{35}$$

$$con: \quad \overline{\Delta\rho} = \overline{\rho_2} - \overline{\rho_1} \tag{36}$$

Si los gradientes no son iguales pero similares, los errores al utilizar esta ecuación son de todas maneras relativamente pequeños.

Para el cálculo del flujo de calor, se debe considerar que la temperatura promedio del flujo que pasa de la zona 1 a la 2, no es igual a la temperatura media de toda la zona 1 (toda la altura de la puerta), sino que es proporcional a la temperatura de la parte superior solamente (sobre la zona neutra); puesto que es desde aquí de donde proviene el flujo. El caso inverso se produce para la zona inferior.

Si se define una temperatura ficticia Tf, de tal forma que al multiplicarla por el flujo, se obtenga el mismo flujo de entalpias que haciendo la integración considerando los perfiles reales de velocidad y temperatura, se obtiene:

$$Q_{1\text{-}2} = \int_{hn}^{H} kq\ c_p\ m_{1\text{-}2}(Z)\ T_1(Z)\ dz = m_{1\text{-}2}\ kq\ c_p\ Tf_1 \tag{37}$$

Despejando Tf_1 se obtiene:

$$Tf_1 = \frac{\int_{hn}^{H} kq\ c_p\ m_{1\text{-}2}(Z)\ T_1(Z)\ dz}{m_{1\text{-}2}\ kq\ c_p} \tag{38}$$

Considerando un perfil de temperaturas lineal y forzando distintas formas para el perfil de velocidades, se resuelve la ecuación 38 para calcular Tf.

Para forzar el perfil lineal de velocidades se utiliza la ecuación 39, donde m es el flujo total, calculado por la ecuación que corresponde según el modelo.

$$V(Z) = \frac{2m(Z-hn)}{w\ \rho(H-hn)^2}\ , \qquad V(Z) = \frac{2\ m\ Z}{W\ \rho\ hn^2} \tag{39}$$

La Tabla 1 muestra los resultados de Tf para los diferentes perfiles. En realidad, lo que aparece es la altura adimensional Xt, a la cual la temperatura en ese punto es igual a la temperatura Tf.

$$Tf_1 = T_{01} + a_1\ X_1\ , \qquad Tf_2 = T_{02} + a_2\ X_2 \tag{40}$$

$$X_1 = X_t(H-hn) + hn\ , \qquad X_2 = X_t\ hn \tag{41}$$

Tabla 1. Valores de Xt en función de la suposición realizada para la forma del perfil de velocidades.

Forma del perfil	Xt
Bernoulli	0.60
Lineal*	0.67

Para la zona superior $xt=(x_1\text{-}hn)/(H\text{-}hn)$
Para la zona inferior $xt=(x_2)/hn$

Xt se mide desde la zona neutra hacia arriba, para el cálculo del flujo superior y de la zona neutra hacia abajo para el cálculo del flujo inferior.

Evidentemente, como Xt es constante, para la aplicación del modelo, no es necesario calcular la integral de la ecuación 38, sino que sólo la temperatura a partir de las ecuaciones 40 y 41 y de la tabla 1.

Luego, el calor neto se calcula mediante las expresiones siguientes.

$$Q_{neto1} = -Q_{1\text{-}2} - Q_{2\text{-}1} + mv\ C_p\ T_{ext} \tag{42}$$

$$Q_{neto2} = Q_{2\text{-}1} + Q_{1\text{-}2} - m_v\ C_p\ T_{\bullet} \tag{43}$$

$$Q_{1\text{-}2} = m_{1\text{-}2}\ kq\ c_p\ Tf_1 \tag{44}$$

$$Q_{2\text{-}1} = m_{2\text{-}1}\ kq\ c_p\ Tf_2 \tag{45}$$

<u>Modelo Simplificado Para Sistemas Estratificados Sin Extractor de Aire.</u> El método anterior se puede extender para el caso en que no se tiene extractor de aire. En este caso, la ecuación para el flujo de aire es:

$$m = \frac{k\ H\ W\ \rho}{3}\sqrt{\frac{g\ (\overline{T_1}-\overline{T_2})\ H}{\overline{T}}} \tag{46}$$

Para el cálculo del flujo de aire, las temperaturas medias T_1 y T_2 son los promedios de toda la altura, ya que en el fondo se esta midiendo la diferencia de peso de las dos columnas de aire.

Para el cálculo del calor transferido, se utiliza la siguiente ecuación:

$$Q_{neto} = m\ c_p\ kq\ (\ Tf_1 - Tf_2) \tag{47}$$

RESUMEN DE LOS MODELOS MAS RELEVANTES

Dentro de todos los modelos analizados anteriormente se retendrán 3, que serán utilizados con posterioridad y que se definen como sigue:

- Modelo 1: Correspondiente al modelo simplificado de una ecuación para el flujo. Este se compone de las ecuaciones: Cálculo del flujo Ec. (46) y cálculo del calor Ec. (47).
  El flujo de aire producido por el extractor mecánico se trata como una superposición al modelo original.
- Modelo 2: Corresponde al modelo simplificado con extractor y estratificación. Las ecuaciones principales del modelo son : 33, 34, 35, 42, 43, 44 y 45.
- Modelo 3: Corresponde al modelo detallado completo. Las ecuaciones principales del modelo son : 10, 12, 13, 14, 15, 16, 20 y 21.

VALIDACION EXPERIMENTAL

Descripción del Equipo Experimental y de las Experiencias. Para validar los modelos, se realizaron una serie de experiencias de laboratorio. Las experiencias fueron realizadas por el autor, en una cámara climática del Laboratorio de Termodinámica de la Universidad de Lieja (Fissore 1991).

La cámara consta fundamentalmente de dos recintos de 2.5 x 2.5 x 2.4 [m] cada uno, unidos entre sí por un espacio que simula una puerta abierta. En la zona caliente se ubicaron placas de calefacción y en la zona fría se ubicaron placas metálicas huecas, por las que se hacia circular agua fría. Tanto las placas frías como las calientes se ubicaron en las paredes laterales cerca del fondo, de tal forma de evitar que los chorros convectivos que producen estos elementos, pudieran influenciar los movimientos en el plano de la puerta. Esto se comprobó mediante visualización con humo.

Mediante 8 columnas de 11 termocuplas cada una, se midió el campo de temperaturas del aire en cada zona. Se ubicaron también una serie termocuplas en las paredes y en los elementos calefactores.

En el plano de la abertura se ubicó un sistema de posicionamiento, comandado por un computador desde el exterior. Sobre el cabezal del sistema de posicionamiento, se montó un anemómetro y una termocupla. Este sistema permite medir velocidad y temperatura en cualquier punto de la abertura.

El anemómetro utilizado es un anemómetro de hilo caliente, el cual tiene un sistema que hace vibrar el sensor de velocidad. Esto permite medir además de la velocidad, la dirección de ésta.

Adicionalmente, se mide la potencia eléctrica en la placa calefactora y el flujo y diferencia de temperaturas en el agua, para obtener el flujo de calor de enfriamiento.

Cada experiencia consiste en una etapa inicial donde se pone en régimen la cámara de ensayos. Una vez estabilizadas todas las variables, se procede a la experiencia propiamente tal, donde se miden durante 1 a 2 horas todas las temperaturas (paredes y aire) y 55 puntos ve velocidad y temperatura en la abertura.

Para calcular el flujo de calor que atraviesa la abertura debido al flujo de aire, se utilizan las ecuaciones:

$$Qc + Qcal + Qpc + Qr,i = 0 \tag{48}$$

$$Qf + Qfrio + Qpf + Qr,i = 0 \tag{49}$$

$$Qcp = (Qc + Qf) / 2 \tag{50}$$

donde Qcp es el calor del aire que pasa por la abertura, Qcal es el calor de calefacción, Qfrío el calor de enfriamiento en lado frío, Qpc el calor perdido a través de las paredes del lado caliente de la cámara y de la pared entre las zonas, Qpf es el equivalente a Qpc pero para el lado frío, y Qr,i el calor transferido por radiación a través de la abertura.

En teoría, Qc y Qf deberían ser iguales. Como en la práctica, debido a errores de medición son un poco diferentes, se utiliza un promedio de ellos.

Se realizaron 5 experiencias con diferentes flujos de calor como único parámetro que se modificó.

Resultados Experimentales. La tabla 2 muestra los resultados de los ensayos, donde Qcp se mide en W y el flujo de aire (m) en kg/s.

Tabla 2. Resultado de las experiencias

Ens.	T_{01}	a_1	T_{02}	a_2	Qcp	m
1	24.7	3.1	21.9	3.3	691	0.101
2	21.5	1.5	19.7	1.9	267	0.083
3	21.9	2.1	19.7	2.4	432	0.094
4	23.9	3.3	20.7	3.7	756	0.104
5	21.3	1.7	19.3	2.0	325	0.091

Comparación de Resultados Experimentales con Modelo. La Figura 2 muestra un perfil de velocidades típico en la abertura, y se compara con el perfil teórico del modelo completo (ecuación 5). Como se observa, el perfil medido no se ajusta bien al modelo teórico. En realidad, se podría decir que el perfil real se aproxima mejor a un perfil lineal.

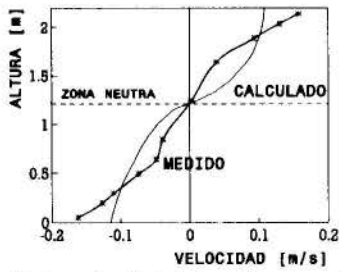


Figura 2. Perfil de velocidad típico. Comparación del perfil medido con el calculado.

Esto se puede explicar debido a que existen muchas diferencias entre el modelo teórico y la realidad. Entre otras, que el flujo no es laminar sino turbulento. Esto produce que circulen torbellinos a través de la puerta. Además, lo más probable es que la posición de la zona neutra sea fluctuante en el tiempo, y lo que se mide son valores promedios. Por otro lado, otros autores (Mahajam, 1987) también han reportado mediciones de un perfil similar al mostrado en la Figura 2. Se debe tener claro que la forma del perfil de velocidades tiene una implicancia importante en el cálculo del calor transferido, según el modelo explicado anteriormente.

Cálculo de los Coeficientes Empíricos del Modelo. La tabla 3 muestra el valor de k y kq obtenido a partir de la comparación de las mediciones con el modelo más detallado. Debido a que se tienen dudas respecto a la forma del perfil, para el cálculo del Q se considero tanto un perfil según la ecuación 5 o forzando un perfil lineal (Eq. 39). kq,b es el kq obtenido aplicando el perfil de velocidades de la ecuación 5 y kq,l es el kq obtenido forzando un perfil lineal de velocidades.

ANALISIS Y COMENTARIOS

Dado que la realidad muestra que el perfil de velocidades se aproxima mejor a un perfil lineal, se propone utilizar esta forma de perfil para calcular el calor transferido. Esto no significa que todo el desarrollo basado en la teoría de bernoulli no sea válido, ya que lo único que se ha cambiado es la forma del perfil de

velocidad para el cáclulo del flujo de calor (no para el cálculo del flujo de aire). En otras palabras, esta modificación de la forma del perfil, se debería tomar como un coefciente empírico más del modelo.

Tabla 3. cálculo de k y kq

Ensayo	k	kq,b	kq,l
1	.282	.96	.90
2	.312	.92	.86
3	.302	.96	.90
4	.280	.93	.86
5	.308	.90	.84
promedio	.297	.93	.87

El modelo 3 también se puede adecuar de tal forma de calcular el calor forzando un perfil lineal de temperaturas, como se hizo para obtener los datos de la tabla 3. En efecto, la ecuación 17 se puede escribir también como:

$$Q_{1\text{-}2} = \rho \int_{h_n}^{H} V(Z) c_p T_1(Z) \qquad (51)$$

donde V(Z) se reemplaza por el perfil de la ecuación 39.

Luego, si para el cálculo del calor transferido se utiliza una forma del perfil dada por el teorema de bernoulli, se debería utilizar el valor de kq,b. En cambio, si se utiliza un perfil lineal se debe utilizar el kq,l. Si se utilizan diferentes valores de kq, según corresponda, para las condiciones de las experiencias, ambos modelos serían prácticamente iguales. Sin embargo, si se quiere extrapolar a otras condiciones, por ejemplo un puerta de mayor altura, se debe tener cuidado de utilizar la hipótesis correcta. Según nuestra experiencia, se recomienda utilizar la formulación con el perfil lineal.

Comparación de los Diferentes Modelos. Se realizó una serie de cálculos del flujo de calor y masa para diferentes condiciones y utilizando diferentes modelos. Los modelos considerados son los modelos 1, 2 y 3, con un perfil lineal para la velocidad. Las condiciones de borde utilizadas fueron: T_{01} y T_{02}, las que se mantuvieron constantes en 25 y 20°C respectivamente. Los gradientes de temperatura (a_1 y a_2) se variaron entre 0 y 4 [°C/m], y el flujo de aire forzado (m_v) entre 0 y 0.03 [kg/s] (0 a 90 m^3/h). Considerando dichos resultados, y haciendo además un análisis de la validez de cada hipótesis, se concluye lo siguiente:

- La diferencia entre el modelo 2 y 3 es muy pequeña. Las diferencias son en general despreciables, salvo en el caso en que los gradientes entre las dos habitaciones es muy distinto (mayor gradiente en habitación 2), donde se alcanzan diferencias máximas de 5%.

- Entre el modelo 1 y 3 las diferencias son mayores aunque tampoco muy altas. Sin extractor mecánico, las diferencias en el flujo de aire son despreciables y en el flujo de calor llegan a un máximo de 10%. Con un extractor de 0.03 kg/s, las diferencias en el flujo de aire son del orden e 10%, alcanzando hasta valores máximos de a 15%. En el flujo de calor, también con extractor, las diferencias normales son del orden de 15% alcanzando a valores máximos del orden de 25%.

CONCLUSIONES

Según el estudio realizado, se piensa que el modelo que entrega un mejor equilibrio entre la complejidad del cálculo y la calidad de los resultados es el modelo 2.

En algunas aplicaciones de estudios preliminares, donde no se necesite gran precisión, donde no se tengan flujos de aire forzados y sin grandes diferencias en los gradientes de temperaturas, se puede utilizar también el modelo 1.

Aunque se requiera una buena precisión, no se recomienda utilizar el modelo 3 en vez del modelo 2; ya que las diferencias con el modelo 2 son pequeñas, comparado con el error absoluto que tiene el método.

Para todos los modelos, se recomienda utilizar la forma de perfil lineal para las velocidades en el cálculo del calor transferido. Los valores de las constantes empíricas obtenidas, considerando este perfil lineal fueron: k=0.3 y kq=0.87.

Aunque el modelo se validó con una geometría en particular, se estima que éste puede ser utilizado en otras condiciones geométricas, siempre que no sean muy diferentes. Sin embargo, se debe tener en cuenta que existen una serie de otros factores que podrían modificar este flujo, como por ejemplo: chorros de convección presentes en el recinto por otras fuentes, espesor de la abertura, efecto de la puerta, turbulencia del aire, etc.

REFERENCIAS

Allard F., Utsumi Y. 1992. Airflow through large openings. Energy and Buildings Vol. 18.

Barcyns R. 1995. Transferencia de calor y materia a través de una conección vertical entre dos recintos. Memoria de título para optar al título de Ingeniero Civil Mecánico. Universidad de Concepción.

Fissore A. 1991. Experimental study of the convective heat exchange through a large opening. Research Report. Laboratory of Thermodynamics. University of Liege.

Mahajan B. M. 1987. Measurement of interzonal heath and mass transfer by natural convection. Solar Energy Vol. 38 N°6, pp 437-446.

Riffat, S.B. 1989. A study of heat and mass transfer through a doorway in a traditionally built house. ASHRAE Trans. VA-89-6-2.

Santamouris M. et al. 1995. Heat and mass transfer through large opening by natural convection. Energy and Buildings Vol. 23.

ABSTRACT

This paper discusses different models of heat and mass transfer through large openings by natural convection. All models are based in the bernoulli's equation. The model can consider effects of natural and forced ventilation. Results of model are compared with measurements in a full size test room.

COOLING LOADS FROM HEAT AND MOISTURE TRANSFER THROUGH POROUS WALLS: SENSITIVITY TO TREATMENT OF TRANSFER COEFFICIENTS IN THE PHILIP AND DE VRIES MODEL

N. Mendes[1] and F. C. Winkelmann
Energy and Environment Division
Lawrence Berkeley National Laboratory
Berkeley, CA 94720, USA

R. Lamberts, P.C. Philippi,
J.A.B. da Cunha Neto and A. Pedrini
Mechanical Engineering Department
Federal University of Santa Catarina
88049-900 - Florianópolis - SC, Brazil

SUMMARY

We show the effects on cooling loads and calculation time of simplifying a dynamic model of combined heat and mass transfer with variable material properties, under varying boundary conditions. The simplifications were applied to formulation terms and material properties. The weather used was a hot/humid summer period in Florianópolis, Brazil. The room air temperature and relative humidity were calculated with the DOE-2.1E building energy simulation program. The materials studied were autoclaved aerated concrete, brick, lime mortar and wood. Some of the simplified models showed significant reduction in calculation time and reasonable accuracy.

INTRODUCTION

In building energy analysis, calculated heat conduction through walls usually neglects the storage and transport of moisture in the porous structure of the walls. However, walls are normally subject to both thermal and moisture gradients so that an accurate heat transfer determination requires a simultaneous calculation of both sensible and latent effects. The transfer of moisture through common building materials, such as wood, concrete and brick, depends on the complex morpho-topological characteristics of the pores in these materials.

Besides its effect on heat transfer, moisture has other implications, especially in hot/humid climates. It is well known that moisture can cause damage to the building structure and can promote the growth of mold and mildew, affecting the health of building occupants. Therefore, it is important consider hygroscopic phenomena in building energy simulation, however, this usually implies high run times.

Several investigators have developed models for moisture transport in buildings. Cunningham (1988) developed a mathematical model for hygroscopic materials in flat structures that uses an electrical analogy with resistances for the vapor flow and an exponential approximation function with constant mass transport coefficients. Kerestecioglu and Gu (1989) investigated the phenomenon using evaporation-condensation theory in the pendular state (unsaturated liquid flow stage). The application of this theory is limited to low moisture content. Burch and Thomas (1991) developed a computational model, MOIST, using the finite-difference method to estimate the heat and mass transfer through composite walls under non-isothermal conditions. The thermal conductivity was considered constant and the latent heat due to phase change within the wall was neglected. This program is also limited to low moisture content. El Diasty et al. (1993) used an analytical approach that assumed isothermal conditions and constant transport coefficients. Liesen (1994) used evaporation-condensation theory and a response factor method to develop and implement a model of heat and mass transfer in the building thermal simulation program IBLAST (Integrated Building Loads Analysis and System Thermodynamics). To use this method, hygrothermal property variations were neglected. There is no liquid transfer. This program is restricted to very low moisture content but has the advantage of short calculation time. Yik et al. (1995) developed a simplified model integrated with air-conditioning system component models that employs evaporation-condensation theory with differential permeability. It is a fast model, but only applicable to materials that stay in the pendular state.

The first step in our work is to describe a new, dynamic model that avoids the assumptions and restrictions of the above approaches. This model allows the cooling loads due to combined heat and moisture transport through walls to be calculated for a wide range of materials, even under extreme conditions in hot/humid climates.

For the walls we consider sensible and latent surface convection, absorbed solar radiation, heat and mass transfer through the wall, and vapor/liquid phase change. They walls are described mathematically using the model of Philip and DeVries (1957) in which vapor and liquid flow under moisture and thermal gradients. In this model, heat, vapor and liquid flow are taken to be simultaneous and coupled. Physical quantities, such as mass transport coefficients, thermal conductivity and specific heat, are variable and depend on wall temperature and moisture content

We have created submodels from this model by making various simplifications, such as assuming constant coefficients, neglecting latent effects within the wall, working with both "pure" and "apparent" thermal conductivity and reaching, in most simplified form, Fourier's equation for transient heat flow. From these submodels we can determine how the simplifications effect accuracy and run time; we can also quantify the effect of the simplificationsmade by some of the authors mentioned above.

Submodel analysis is done for four different types of wall material: autoclaved cellular concrete, brick, lime mortar and wood. The weather used is the most critical summer week in the hot/humid climate of Florianopólis, Brazil. The room air temperature and relative humidity are calculated with the DOE-2 building energy simulation program (Winkelmann et al., 1993).

The submodels compared to the results of the original, unsimplified model to determine the effect on cooling loads and simulation run time.

[1] Visiting Ph.D. Student from Federal University of Santa Catarina, Florianópolis, Brazil.

MATHEMATICAL FORMULATION

The governing partial differential equations are given by equations (1) and (2). They were derived from conservation of mass and energy flow in an elemental volume of porous material.

Energy Conservation Equation:

$$\rho_0 c_m(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\lambda(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}) - L(T)\frac{\partial}{\partial x}(j_v) \quad (1)$$

Mass Conservation Equation:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{j}{\rho_l}\right) \quad (2)$$

Note that eq. (1) differs from Fourier's equation for transient heat flow by an added convective transport term (due to moisture diffusion associated with evaporation and condensation of water in the pores of the medium) and by a dependence on the moisture content (it is coupled to eq. (2)). The driving forces for convective transport are temperature and moisture gradients.

The vapor flow and total flow (vapor plus liquid) are expressed in terms of transport coefficients, D, associated with the thermal and moisture gradients. According to Philip and DeVries (1957), the equations are:

For vapor flow

$$\frac{j_v}{\rho_l} = -D_{Tv}(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x} - D_{\theta v}(T,\theta)\frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (3)$$

For total (vapor plus liquid) flow

$$\frac{j}{\rho_l} = -D_T(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x} - D_\theta(T,\theta)\frac{\partial \theta}{\partial x} \quad (4)$$

Boundary Conditions. The associated conservation equations at the outside and inside wall surface are as follows.

Outside surface (x=0). The outside surface of the wall is exposed to solar radiation, heat and mass convection, and phase change.

Energy Conservation (x=0):

$$-\left(\lambda(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=0} - \left(L(T)j_v\right)_{x=0} = h_{ext}\left(T_{ext} - T_{x=0}\right) + \alpha q_r + L(T)h_{m,ext}\left(\rho_{v,ext} - \rho_{v,x=0}\right) \quad (5)$$

where:

$h_{ext}(T_{ext} - T(0))$ = heat convection;
$\alpha\, q_r$ = absorbed solar radiation;
$h_{m,ext}\left(\rho_{v,ext} - \rho_{v,x=0}\right)$ = phase change energy.

Mass conservation (x=0):

$$-\frac{\partial}{\partial x}(D_\theta(T,\theta)\frac{\partial \theta}{\partial x} + D_T(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x})_{x=0} = \frac{h_{m,ext}}{\rho_l}(\rho_{v,ext} - \rho_{x=0}) \quad (6)$$

Inside surface (x=l). Internally, the wall is exposed to heat and mass convection and phase change.

Energy Conservation (x=l):

$$\left(\lambda(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{x=l} + \left(L(T)j_v\right)_{x=l} = h_{int}\left(T_{int} - T_{x=l}\right) + L(T)h_{m,int}\left(\rho_{v,int} - \rho_{v,x=l}\right) \quad (7)$$

where:

$h_{int}(T_{x=l} - T_{int})$ = heat convection;
$Lh_{m,int}\left(\rho_{v,int} - \rho_{v,x=l}\right)$ = phase change energy.

Mass Conservation (x=l):

$$\frac{\partial}{\partial x}(D_\theta(T,\theta)\frac{\partial \theta}{\partial x} + D_T(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x})_{x=l} = \frac{h_{m,int}}{\rho_l}(\rho_{v,int} - \rho_{x=l}) \quad (8)$$

Submodels. In order to derive the submodels, we can rewrite eq. (1) as:

$$\rho_0 c_m(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\lambda(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}) + L(T)\rho_l\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{Tv}(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}\right) + L(T)\rho_l\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{\theta v}(T,\theta)\frac{\partial \theta}{\partial x}\right) \quad (9)$$

To simplify writing this equation, we will use V_T and V_θ to designate the second and third right hand terms of eq. (9). Table 1 schematically describes the submodels derived from the original model.

Table 1: Schematic description of the submodels derived.

Submodel	Assumptions
0	none (original model)
1	$D_\theta, D_T, D_{\theta V}, D_{TV}, c_m$ and λ = constant
2	$V_\theta = 0$
3	$V_T, V_\theta = 0$
4	$V_T, V_\theta = 0$ and λ = constant.
5	$V_T, V_\theta = 0$ and D_T, D_θ, c_m and λ = constant
6	$D_\theta, D_T, D_{\theta V}, D_{TV} = 0$ and c_m, λ = constant

Since we could not locate all the properties to simulate wood, we made a slight simplification by disregarding V_θ as it is used in the energy conservation equation. The coefficient V_T is implicitly taken in account in that equation by the "apparent" thermal conductivity, λ_{app}, which is available for wood , instead of the "pure" conductivity.

The "apparent" thermal conductivity is related to the "pure" thermal conductivity, λ, by the following expression:

$$\lambda_{app}(T,\theta) = \lambda(T,\theta) + L(T)\rho_l D_{Tv}(T,\theta) \quad (10)$$

Submodel 0 is the same as the original model given by eqs. (1-8). Submodel 1 is the same as the original model except that all coefficients are taken to be constant. Submodel 2 omits the source term in eq. (1), which is associated with a moisture gradient (V_θ). In this case, the equation resulting from eq. (1) can be written as a function of λ_{app} as:

$$\rho_0 c_m(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\lambda app(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}) \quad (11)$$

Therefore, Submodel 2 (which is the most complete model for wood) is obtained by combining eq. (11) and eqs. (2-8)

Now, if we disregard the term $L\rho_l D_{TV}$ in eq. (10), we obtain Submodel 3 by transforming eq. (11) to:

$$\rho_0 c_m(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\lambda(T,\theta)\frac{\partial T}{\partial x}) \qquad (12)$$

Submodel 4 is the same as Submodel 3, except that the pure thermal conductivity, λ, is constant. Submodel 5 takes the coefficients D_θ, D_T and λ to be constant.

All the submodels have the same basic mathematical structure except for Submodel 6 which neglects all moisture effects.

Since we could not obtain $D_{\theta V}$ and D_{TV} for wood, we have not applied submodels 0, 1 and 3 to this material.

SIMULATION PROCEDURE

The submodels were solved with a finite-volume approach that uses a fully implicit solution scheme with coupling between the conservation equations. Using the Patankar (1980) method with uniform nodal spacing and a tridiagonal-matrix solution algorithm, a C program solves the temperature and moisture content distributions iteratively at each time step.

For accuracy, a 30-second time step was used to simulate a 10-cm thick wall (5cm for wood). The initial conditions were taken from results of previous simulation with Submodel 0. The program was run for 45 days before the week of analysis, almost totally reducing the effect of the assumed initial conditions. The mean run time, using Submodel 0, for a 40-node wall on a 66-MHz 486 computer was about 3.5 hours to simulate a 52-day period. Table 2 compares the mean run time for the different submodels relative to Submodel 0.

Table 2: Percent of Submodel 0 run time.

	Submodel						
	0	1	2	3	4	5	6
time (%)	100	16	88	65	38	10	2

The hourly outside dry and wet bulb temperature (DBT and WBT) (Figure 1) were taken from the Test Reference Year weather data for Florianópolis, Brazil.

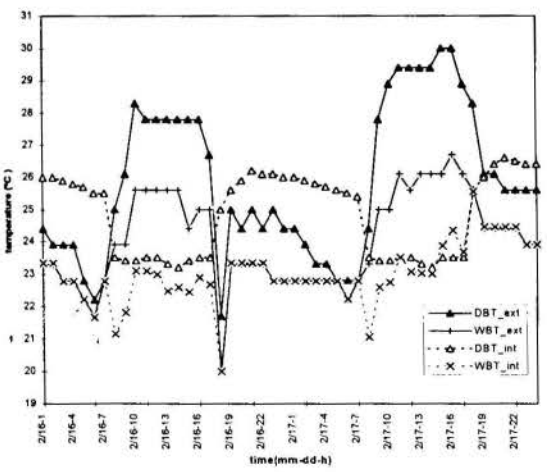


Figure 1: External and internal temperatures for 2/16 and 17.

The inside room dry and wet bulb temperature were obtained from a DOE-2.1E simulation of a room in a 7-floor building in Florianópolis, Brazil. According to Brazilian standards, air conditioning was on only on weekdays from 8am to 5 pm.

The input material properties for autoclaved cellular concrete (ACC) were obtained from Da Cunha Neto (1992) and for wood (WOOD) from Siau (1984). Properties for brick (BRK) and lime mortar (LMT) were obtained from Perrin (1985). The available material data allows all of the transport coefficients to be modeled as a function of moisture content. The basic dry material properties are given in Table 3.

Table 3: Dry material properties.

Property	ACC	BRK	LMT	Wood
ρ_0 [kg/m^3]	385.0	1900	2050.0	500.0
λ (W/m-°C)	0.085	1.11	1.96	0.124
c_m [J/kg-°C]	1000.0	920.0	950.0	1238.2

Table 4 shows the transport coefficients and specific heat when they are considered constant. They were calculated at 25 °C for volumetric moisture content of 9.1%, 1.6% and 10.8% for ACC, BRK and LMT walls, respectively. For wood a moisture content by mass of 25% was used. These moisture levels were obtained from the hourly average values in previous simulations using Submodel 0.

In the simulations we assumed the walls were composed of a single material, with no surface paint or other moisture barrier.

Table 4: Transport coefficient values when assumed constant.

	ACC	BRK	LMT	WOD
D_θ (m^2/s)	3.69e-10	1.75e-09	2.21e-09	2.80e-04
D_T (m^2/s-K)	1.91e-12	1.16e-11	1.46e-11	3.00e-07
$D_{\theta V}$ (m^2/s)	3.69e-10	1.38e-08	1.18e-10	-----
D_{TV} (m^2/s-K)	1.78e-12	1.07e-11	1.40e-11	-----
λ (W/m-K)	0.11	1.14	2.17	0.17*

* Apparent thermal conductivity.

RESULTS

For the different submodels, Figure 2 shows the peak load (sensible and latent) for each material. We see immediately that Submodel 6 always underestimates the peak load since it neglects latent heat conduction.

Latent heat obviuosly plays an important role in determining the peak load. In some cases, there are significant fluctuations in latent load due to a small difference between the air and surface partial vapor pressure. This pressure difference causes the vapor flux to change direction, which represents a pseudo-equilibrium situation that demands a careful interpretation of what the value of the peak load actually is. However, these fluctuations average out when calculating peak daily or weekly loads.

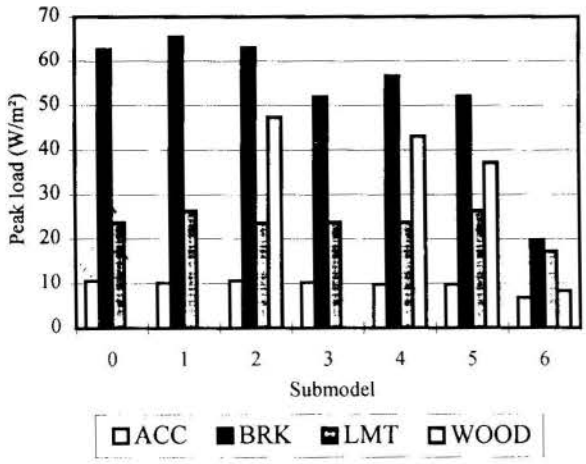


Figure 2: Peak loads for each material and Submodel.

Figure 3 shows the daily cooling loads for ACC for the different submodels (Note that the load is zero on days 5 and 6 because the air conditioner is off). Submodel 6 does poorly for ACC as well as for the other materials (not shown).

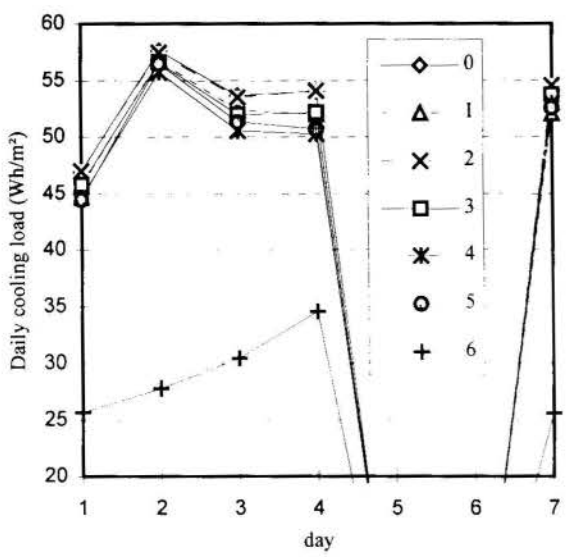


Figure 3: Daily cooling loads for an ACC wall calculated by different submodels.

Table 5 shows the percent error in the weekly load for submodels 1-6 relative to Submodel 0 for ACC, BRK and LMT, and relative to Submodel 2 for wood.

The constant transport coefficients used are those shown in Table 4.

We see from Table 5 that using constant coefficients can lead to acceptable errors for most of the submodels. However, Submodel 4 does poorly for ACC, which we explain below.

In Fig. 4 we show the effect on weekly cooling load of using different (constant) values of moisture content (3%, 10% and 30%) to calculate the heat and mass transport in Submodel 5 at 25°C air temperature.

Table 5: Percent relative error in weekly load and calculation time relative to Submodel 0 (Submodel 2 for wood).

	Submodel					
material	1	2	3	4	5	6
ACC	2.8	0.1	2.3	4.6	4.1	45.9
BRK	0.5	0.9	0.3	0.8	0.4	68.8
LMT	-0.1	0.1	0.1	-0.8	0.1	22.8
WOOD	-----	0	-----	0.6	4.6	64.1
time (%)	16	88	65	38	10	2

We see from this figure (or Table 6) that it is important is to properly estimate the constant value used for the coefficients. We note that the effect of temperature on material properties is generally much less than that of moisture. This depends, of course, on the higroscopic characteristics, temperature and humidity level of the material.

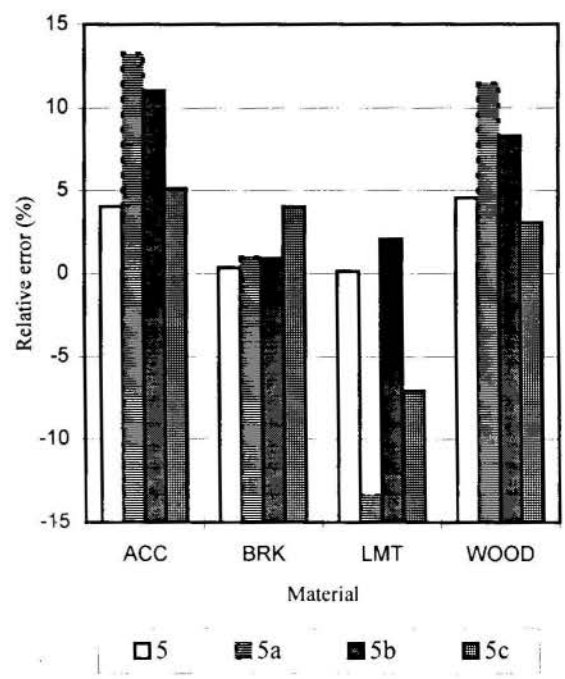


Figure 4: Percent error in weekly cooling load for Submodel 5 relative to Submodel 0 (Submodel 2 for wood), for constant moisture content of 3% (a), 10% (b) and 30% (c).

DISCUSSION

We discuss here the effects of the simplifying assumptions in the different submodels.

Submodels 2 and 3. First we omitted V_θ, which represents latent specific heat associated with a moisture gradient. We decided to neglect this convection term because the moisture gradient usually has more influence on liquid transport than on vapor transport. We also noticed that, for some materials, $\partial\theta/\partial x$ is small for most wall nodes. The resulting simplification (Submodel 2) gave good results, with percent relative errors below 1% (see Table 5).

Submodel 3 neglects, in addition, V_T; this means, in effect, that the "pure" and "apparent" thermal conductivities are equal. This is generally true for low temperatures (near 0°C) or low

temperature gradients. This Submodel showed a maximum error of 2.3% in the weekly load for ACC, which is attributable to the fact that the relation D_{TV}/λ is important and the low thermal mass leads to high temperature gradients. However, for wood, this simplification probably would have had larger errors, since D_{TV} is higher; unfortunately, we were unable to analyze wood for this Submodel.

One motivation to omit this source term was based on the porous structure. When water released by evaporation leaves a pore or a liquid island, the vapor diffuses through the medium until it encounters a small cavity or liquid island, where it condenses, releasing energy by phase change. As a result, the heat balance is more or less unchanged since the evaporated and condensed portions are roughly equal.

Submodel 4: Omit the Source Term in Eq. (1) and Assume Constant Thermal Conductivity. Neglecting the source term in eq. (1) and assuming constant thermal conductivity leads to reasonable results at an average of 38% of the calculation time of Submodel 0.

The accuracy of the results in this case depends on the value for λ in eq. (12) and $\partial\theta/\partial x$. Basically, these depend on the geometric and thermophysical characteristics of the room envelope, and on the climate and internal conditions.

For low moisture content, the "apparent" thermal conductivity is close to the dry thermal conductivity. This is the case for which the MOIST program of Burch and Thomas (1991) is expected to be most accurate. We believe, therefore, the results obtained from MOIST are reliable when there are moisture barriers and low infiltration loads.

However, in certain cases, the error caused by assuming λ is constant can be larger if an incorrect value of λ is used, especially when $\partial T/\partial x$ and $\partial\lambda/\partial\theta$ are large, as for ACC and wood. For example, a Submodel 4 simulation for ACC, using a dry basis λ, led to errors as high as 20% in the weekly cooling load. There is also the problem mentioned above: if the moisture content is high the temperature will be delayed relative to the moisture content because the thermal mass is higher and the conductivity is constant. Normally, using the dry value of conductivity will lead to the largest distortions when the climate is very humid.

Submodels 1 and 5: Omit the Source Term in Eq. (1) and Assume Constant Coefficients. Submodels 1 and 5 both assume constant coefficients. The difference between these submodels is that Submodel 1 retains the source term. However, from Table 5 and the comments in submodels 2 and 3, we see that the difference between these submodels is small.

It is interesting to note that for BRK, Submodel 5, even though it is less complete, sometimes gives smaller errors than submodel 1. We also see that, for the same material, the errors obtained by using Submodel 2 are higher than those obtained by using submodels 3, 4 and 5. A possible explanation for this is that heat and mass can flow in opposite directions or that we can have a source term decreases the load for this material and weather.

As in submodel 4, omitting the source term in eq. (1) and assuming constant coefficients can produce reasonable results when the correct coefficients are used and when temperature and moisture gradients are small.

Submodels 4 and 5 for wood both gave good results, for simulations using θ^*, since D_{TV} is implicitly taken into account and the coefficients are almost constant in the range of moisture content considered.

Submodel 6: Omit Moisture Effects. As expected, omitting moisture effects causes large errors. The main reason for this is that the balance at the wall surfaces completely neglects latent heat exchange.

CONCLUSIONS

We have shown that simplifications of the full Philip and DeVries model can lead to faster heat and mass transfer calculations without large loss in accuracy as long as an appropriate value for θ^* is used.

The best submodel to use depends on what run time is acceptable and on what data are available. For example, Submodel 3 is preferable when $D_{\theta V}$ and D_{TV}, which are usually hard to obtain, are unknown. It is also important to note that most thermal conductivities values found in the literature are "apparent" since the "apparent" conductivity is easier to measure than the "pure" thermal conductivity. Thus Submodel 3 has the advantage of being usable with available material properties; in fact, Submodel 3 becomes Submodel 2 when "apparent" conductivities are used. They are, therefore, possible alternatives to Submodel 0 since they execute in about 1/3 less time.

Submodel 5 can be inaccurate in some cases (Fig. 4 and Table 6). However, it is far more accurate than Submodel 6. If an accurate conduction calculation is not important, Submodel 5 is recommended since it fast executing.

To get accurate results from Submodel 1, 4 or 5 the correct average moisture content must be used, unless there is a vapor barrier and the moisture level is low.

Using a constant moisture content may overestimate or underestimate the conduction loads (Fig. 4). The importance of the correct moisture content depends on the material, the weather, and the internal conditions.

Some materials, such as brick, have a very low moisture content and gradient, and so are relatively insensitive to the model simplification used. Also, since brick has high latent conduction loads, the cooling loads increase substantially when moisture is considered.

In conclusion, we have shown that different simplifications of the full Philip and DeVries model exist that are faster executing and are substantially more accurate in hot/humid climates than models that neglect moisture effects.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank CNPq - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (Brazilian Research Council) of the Ministery for Science and Technology of Brazil, UFSC, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis, Brazil for support of this work. One of the authors (Nathan Mendes) gives special thanks to Lawrence Berkeley National Laboratory for its technical support and hospitality.

REFERENCES

Burch D.M. and Thomas W.C., "An Analysis of Moisture Accumulation in Wood Frame Wall Subjected to Winter Climate", NISTIR 4674, Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 1991.

Cunningham M.J., "The Moisture Performance of Framed Structures: A Mathematical Model", Bldg Envir. 23, pp 123 - 135, 1988.

Cunha Neto, J. A. B., "Transport d'humidité em matériau poreux en présence d'un gradient de température. Caractérisation expérimentale d'un béton cellulaire", Thèse de Docteur, Grenoble, Université Joseph Fourier - Grenoble I, 1992, 194p.

El Diasty R., Fazio P. and Budaiwi I., "Dynamic Modelling of Moisture Absorption and Desorption in Buildings", Bldg Envir. 28, pp 21-32, 1993.

Kerestecioglu A. and Gu L., "Incorporation of the Effective Penetration Depth Theory into TRNSYS", Draft Report, Florida Solar Energy Center, Cape Canaveral, Florida, 1989.

Liesen, R.J., "Development of a Response Factor Approach for Modeling the Energy Effects of Combined Heat and Mass Transfer with Vapor Adsorption in Building Elements", Ph.D. thesis, Mechanical Engineering Department, University of Illinois, 1994.

Patankar S.V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw-Hill, 1981.

Perrin, B., "Etude des transferts couplés de chaleur et de masse dans des matériaux poreux consolidés non saturés utilisés en génie civil", Thèse Docteur D'Etat, Toulouse, Universite Paul Sabatier de Toulouse, 1985. 267p.

Philip, J. R. and De Vries, D. A., "Moisture movement in porous materials under temperature gradients", Transactions of the American Geophysical Union. v.38, n.2, p.222-232, 1957.

Siau J.F., "Transport Processes in Wood," Springer-Verlag, New York, 1984.

Winkelmann, F.C., et al. DOE-2 Supplement-Version 2.1E. Berkeley, CA: Lawrence Berkeley National Laboratory, 1993.

Yik F.W.H., Underwood C.P. and Chow W.K., "Simultaneous Modelling of Heat and Moisture Transfer and Air-conditioning Systems in Buildings", Proc. IBPSA Building Simulation '95, 4th International Conference, Madison, WI, USA, 1995.

ESTUDO EXPERIMENTAL DO COMPORTAMENTO TÉRMICO DE COBERTURAS PLANAS - VEGETAÇÃO E TERRAÇO

Maria Tereza F. Pouey[1], Miguel A. Sattler[2], Paulo S. Schneider[3]
1 - Departamento de Engenharia Agrícola
Universidade Federal de Pelotas - 96010-900 - Pelotas - RS - Brasil
2 - Departamento de Engenharia Civil / NORIE 3 - Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - 90050-170 - Porto Alegre - - RS - Brasil

RESUMO

Este trabalho tem o objetivo de estudar, comparativamente, o desempenho térmico de dois tipos de coberturas planas, a partir de dados experimentais. Os dados foram obtidos em duas montagens experimentais de coberturas planas: uma com vegetação (grama) e outra constituida de terraço (piso), ambas avaliadas em situação de verão. Os elevados valores de temperatura superficial atingidos no terraço determinam a necessidade de uso de isolamento térmico neste tipo de cobertura. Os dados mostram que, do ponto de vista do desempenho térmico, a cobertura com vegetação, com menores temperaturas superficiais e interna, constitui uma melhor solução que as coberturas tradicionais bem isoladas.

INTRODUÇÃO

O uso de vegetação em coberturas de edificações não é uma proposta recente, sendo há muito empregada na Europa, principalmente em países como Alemanha, Itália, Inglaterra, Áustria, Dinamarca entre outros. No Brasil, esta é uma idéia pouco difundida, encontrando-se apenas poucos exemplos.

A cobertura com vegetação pode apresentar vantagens tanto de ordem técnica como estética e psicológica. Entre as vantagens de ordem técnica são citadas: isolamento termo/acústico, proteção da impermeabilização e redução das patologias em lajes de coberturas pela redução do gradiente de dilatação térmica e diminuição e/ou retardamento do volume de águas pluviais escoadas nas redes dos centros urbanos. Além disto, a estética diferenciada, a alteração do microclima local e o efeito psicológico tornam a paisagem urbana menos árida e a qualidade de vida melhor.

O estudo do efeito térmico do uso de vegetação em construções tem sido desenvolvido em países como o Japão e Alemanha. Hoyano (1984) desenvolveu um experimento que avaliou o efeito causado pelo uso de vegetação em coberturas no ambiente interno da construção. Para tanto, monitorou 3 bancadas, em que a diferença básica entre elas era o acabamento superficial externo da cobertura, ou seja: vegetação rasteira, vegetação densa e solo nu. Posteriormente, Hoyano (1988) estudou o efeito de vegetação como coberturas de ambientes abertos, como barreira de sombriamento de paredes e como cobertura aderente a paredes. Wilmers (1990) avaliou o efeito da vegetação no clima urbano e em edificações. Harazono et al (1991) estudaram o efeito de coberturas com vegetação e substrato artificial no clima urbano e na carga térmica de construções. Vários autores como Honjo e Takakura (1991), Kawashima (1990), Meier (1991) e Saito et al (1991) têm estudado a influencia da vegetação ou áreas verdes no clima urbano.

A cobertura é o elemento da edificação mais exposto a radiação solar durante o verão. Portanto, é responsável por grande parcela do fluxo de calor transferido ao ambiente interno. O uso de solo vegetado sobre uma laje de cobertura reduz consideravelmente o efeito da insolação, pois de um lado a vegetação reflete e absorve a radiação solar, e de outro lado o substrato para esta vegetação representa uma barreira adicional a passagem de calor.

O presente estudo se propõe a avaliar um dos aspectos de desempenho da cobertura com vegetação, isto é, o comportamento térmico, comparando-o com uma cobertura plana tipo terraço.

Sobre este aspecto, a revisão bibliográfica realizada indicou a ausência de trabalhos comparativos entre coberturas vegetais e outras convencionais. Um arranjo experimental foi elaborado para representar em escala natural estes dois tipos de coberturas, para as quais são apresentados os comportamentos observados em situação de verão.

CARACTERÍSTICAS DA ÁREA DE ESTUDO

O experimento foi desenvolvido no Campus Universitário da Universidade Federal de Pelotas - UFPel - junto a Estação Agroclimatológica da EMBRAPA, Pelotas - RS

A cidade de Pelotas, está situada no interior do estado do Rio Grande do Sul, tendo como coordenadas geográficas 31°46'S de latitude, 52°21' O de longitude e 13,0 m de altitude. Situada às margens da Lagoa dos Patos, tem seu clima influenciado pela presença deste grande volume de águas. De acordo com a classificação de Nimer (1989), o clima da região é do tipo temperado.

Segundo as normais climatológicas, referentes a um período de 30 anos (1961 a 1990) fornecido pela Estação Agroclimatológica UFPEL/EMBRAPA, os meses de dezembro a março são os mais quentes, sendo janeiro e fevereiro os meses de temperaturas mais elevadas (média das máximas igual a 28,2 °C). No inverno os meses mais frios são junho, julho e agosto, apresentando mínimas absolutas de até 3,8 °C negativos. Os meses que apresentam umidade mais baixa são dezembro e janeiro (74,8 e 76,1%), enquanto os meses de maio a setembro são os mais úmidos (82,8 a 85,4%).

Bancada Experimental. Para o estudo proposto, foi executada uma bancada experimental em escala natural, implantada na área da Estação Agroclimatológica do Convênio UFPel / EMBRAPA. O projeto da bancada é uma adaptação daquela desenvolvida e empregada por Lamberts (1983) para estudar o desempenho térmico de coberturas leves com ático. A bancada (figura 1) constitui-se de uma pequena construção de 4,0 m x 2,6 m de planta baixa e 1,4 m de pé direito, tendo como piso uma laje de concreto e paredes de pedra granítica, envolvida ainda

por taludes de terra por todos os lados e coberta por três coberturas independentes, duas das quais são o objeto do estudo.

O talude foi executado a fim de aumentar a inércia térmica das paredes, fazendo com que nas horas de pique da temperatura do ar externo e da radiação solar, o fluxo térmico pelas coberturas seja o mais significativo.

Na fachada sul, encontra-se uma porta que permite o acesso para a colocação da instrumentação.

Na parte central da bancada, foi executada uma laje de concreto pouco adensado, com 10 cm de espessura, num nível 15 cm abaixo das lajes laterais. Esta laje foi mantida sombreada com telhas de barro e é separada das demais por material isolante térmico, servindo de elemento separador das coberturas em estudo, e evitando a criação de pontes térmicas.

Nas laterais da bancada, foram executadas duas lajes de concreto armado com 10 cm de espessura, ambas no mesmo nível.

Conforme o acabamento final que tenham recebido, vegetação ou terraço, as lajes serão referidas como CV e CT, respectivamente.

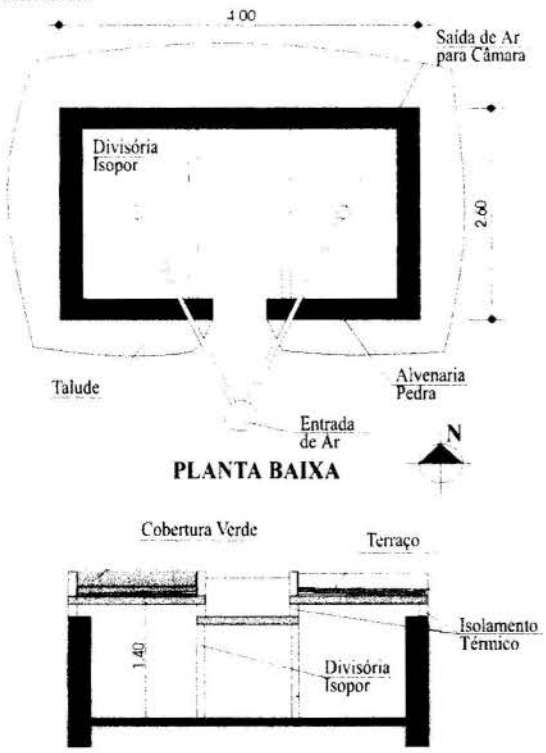


Figura 1 - Vistas da bancada experimental

Internamente, a bancada foi dividida em 3 câmaras, de tal forma que a cada cobertura corresponda uma câmara. A divisão foi feita com folhas justapostas de isopor, com espessura total de 25 mm.

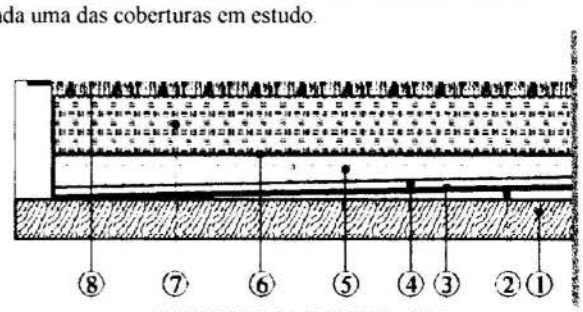
A bancada é dotada de um sistema de ventilação, a fim de evitar a estratificação e retirar o excesso de umidade. A entrada de ar se dá através de tubulações subterrâneas, que trazem o ar de uma tomada ao sul da bancada e a exaustão é feita por chaminé situada na laje central.

Coberturas Analisadas. As lajes das coberturas analisadas, CV e CT, receberam os mesmos serviços de impermeabilização com manta asfáltica e posterior camada de proteção mecânica. A partir de então, as coberturas se diferenciam.

Na CV, sobre a proteção mecânica, foi colocada uma camada de brita, com 7 cm de espessura, com função drenante. Sobre ela, foi disposta uma manta geotêxtil, e então 11 cm de solo vegetal, sobre o qual foi assentada grama em leiva, totalizando 15 (11 + 4) cm de espessura de solo gramado. Nesta laje foi previsto um sistema de drenagem para as águas da chuva e de irrigação.

Na CT, sobre a camada de proteção mecânica, foi colocado o isolamento térmico, que constitui-se de placas moldadas de poliestireno expandido de alta densidade (Isofoam) com 25 mm de espessura. Posteriormente foi assentado o piso, que constitui-se de lajotas cerâmicas de 20 x 20 cm, com caimento de 2% para escoamento das águas pluviais. O emprego de um bom isolante térmico nesta laje, teve como objetivo garantir que o elemento de comparação fosse de boa qualidade.

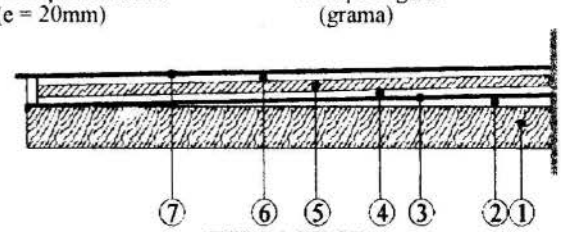
A Figura 2 mostra o detalhe das camadas constituintes de cada uma das coberturas em estudo.



COBERTURA VERDE - CV

LEGENDA:

1. Laje concreto armado (e = 100mm)
2. Camada de regularização (i = 2%)
3. Impermeabilização (e = 4mm)
4. Proteção mecânica (e = 20mm)
5. Camada drenante (brita - e = 70mm)
6. Manta geotêxtil (e = 2mm)
7. Terra vegetal (e = 150mm)
8. Capa vegetal (grama)



TERRAÇO CT

LEGENDA:

1. Laje concreto armado (e = 100mm)
2. Camada de regularização (i = 2%)
3. Impermeabilização (e = 4mm)
4. Proteção mecânica (e = 20mm)
5. Isolamento térmico (e = 25mm)
6. Argamassa Assentamento (e = 20mm)
7. Piso Cerâmico

Figura 2 - Camadas constituintes das coberturas em estudo

Instrumentação. Os dados de temperaturas foram obtidos com termômetros de resistência de platina (Pt100) e os dados de radiação solar com sensores tipo piranômetros construídos a partir de células fotovoltaicas. Estes sensores foram ligados a um sistema de aquisição e registro de dados (data logger).

A umidade do solo foi obtida indiretamente, a partir das leituras de um tensiômetro instalado na CV. Estas leituras foram feitas três vezes por dia, nos horários das 8 hs, 12 hs e 17 hs.

O perfil de distribuição da temperatura através das coberturas foi avaliado por meio de sensores Pt 100 colocados em vários níveis de profundidade. Conjuntos iguais de sensores foram dispostos no centro e próximo ao apoio da laje, para verificar a validade da hipótese de difusão de calor unidimensional. Em ambas as coberturas foram medidas temperaturas superficiais internas, externas e sobre a camada de proteção mecânica da impermeabilização; na CV foi medido mais um nível, isto é, a

temperatura do solo sobre a manta geotêxtil. (Corte transversal na figura 3).

No interior, de cada câmara, foram medidas a temperatura do ar e temperatura de globo (vista superior na figura 3). Estes sensores foram localizados numa altura correspondente a meio pé direito.

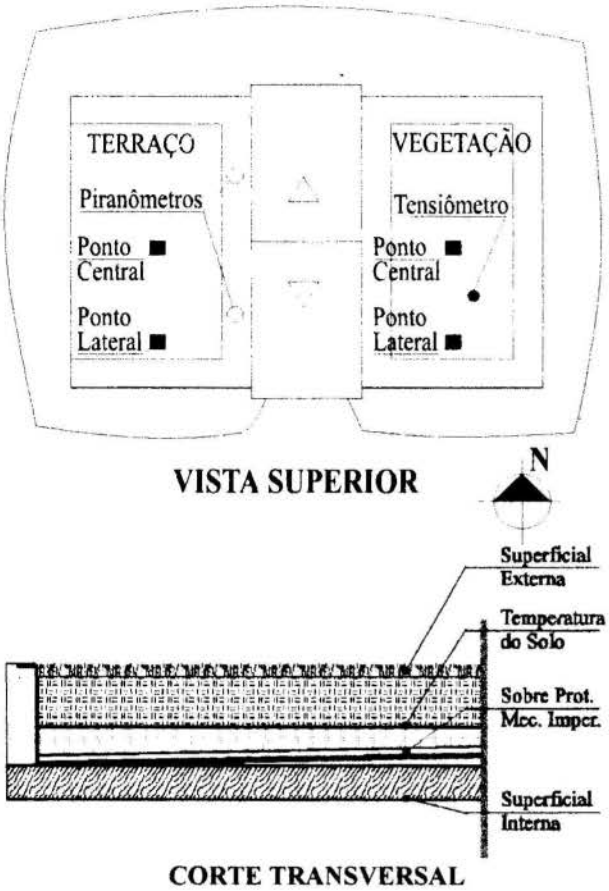


Figura 3 - Pontos de instalação dos sensores

Os sensores de temperatura do ar foram protegidos dos efeitos de radiação por um dispositivo constituído por dois cilindros concêntricos, de diâmetros diferentes, ambos revestidos externamente com folha de papel alumínio.

Externamente foi registrada a temperatura do ar, radiação solar global e difusa. Os piranômetros utilizados são construídos a partir de células fotovoltaicas (Zanesco, 1991).

Medições. As medições foram realizadas durante os meses de janeiro e março de 1996, sendo as leituras registradas a cada 30 minutos. Neste trabalho caracterizou-se o comportamento térmico das coberturas, ao longo de um período de uma semana em que ocorreram condições climáticas diversas, tais como dias claros, com temperatura elevada, chuva e temperatura em declínio.

Os três primeiros dias do experimento foram de céu claro a parcialmente nublado, com radiação solar global diária em torno de 27 x 10^6 J/m^2 e temperatura máxima variando de 27,4 a 31,6 ^{0}C. No quarto dia, a temperatura elevou-se, chegando a 35,2 ^{0}C e a tarde, em torno das 19 horas, houve uma chuva forte e queda brusca de temperatura; o dia seguinte foi nublado e chuvoso. A partir de então, o tempo melhorou, porém com decréscimo da temperatura e a radiação voltando aos níveis iniciais.

Tabela 1 - Dados climáticos para os dias em analise

Dia	Temperatura Máx. - Min (^{0}C)	Radiação Global Diária (J / m^2)	Velocidade do Vento. (m/s)	Condição do céu
08/01	27,4 - 15,2	26,66 x 10^6	3,8	claro
09/01	31,6 - 21,0	26,96 x 10^6	2,0	claro
10/01	30,6 - 20,0	28,46 x 10^6	3,3	claro
11/01	35,2 - 22,8	21,35 x 10^6	3,2	claro, chuva a tarde
12/01	27,8 - 20,0	14,61 x 10^6	2,9	nublado
13/01	28,2 - 19,8	20,60 x 10^6	1,9	parcialmente nublado
14/01	24,6 - 18,2	27,29 x 10^6	3,8	claro

No experimento foram medidas as temperaturas superficiais, temperaturas do ar interno e externo, temperatura de globo, umidade do solo e radiação solar global e difusa. Já a velocidade média do vento, umidade relativa do ar, precipitação, horas de insolação e radiação global diária no plano horizontal foram fornecidos pela Estação Agroclimatológica do Convênio UFPel / EMBRAPA.

RESULTADOS OBTIDOS

Os comportamentos mais relevantes são apresentados nos gráficos que seguem. A figura 4 mostra a evolução das temperaturas superficiais externas e internas para os dois tipos de coberturas.

Quando as condições climáticas são mais severas, a cobertura terraço apresenta valores absolutos maiores, em ambas as superfícies, em relação a cobertura vegetal, além de experimentar amplitudes mais elevadas. Observa-se que a temperatura superficial externa é a que sofre maiores variações, chegando a uma variação diária de até 14,5 ^{0}C na cobertura verde e 28,9 ^{0}C no terraço. Já a temperatura superficial interna sofre pequenas variações diárias, chegando sua amplitude a atingir até 4,2 ^{0}C, com média em torno de 1,5 ^{0}C, na cobertura verde e alcançando 4,9 ^{0}C, no terraço, com média em torno de 2,5 ^{0}C. Nota-se pela diferença entre as temperaturas superficiais externa e interna que o amortecimento térmico é maior no terraço, chegando a uma diferença de até 20,2 ^{0}C, enquanto que na cobertura verde a diferença máxima chega a 9,9 ^{0}C. Os gráficos mostram que o retardo térmico, na cobertura verde é maior que no terraço, embora a diferença não seja muito grande. Na cobertura verde, o retardo varia de 6 hs e 30 min a 9 hs e 50 min, enquanto, no terraço, varia de 5 hs e 30 min a 7 hs e 30 min.

A figura 5 apresenta as curvas de temperatura relativas às camadas de impermeabilização das duas coberturas. A variação de temperatura sofrida nesta camada, em ambas coberturas, é semelhante. As variações são pequenas, de 1,6 ^{0}C a 2,9 ^{0}C, na cobertura verde e de 2,1 ^{0}C a 4,0 ^{0}C, no terraço. Isto se deve ao fato de ter sido adotado para a disposição da camada impermeabilizante o sistema U.S.D. - up side down, em que a impermeabilização fica protegida termicamente.

A figura 6 mostra as temperaturas do ar interno às duas coberturas, além da evolução da temperatura do ar exterior.

Durante o experimento, a temperatura do ar exterior sofreu variações diárias de até 12,4 ^{0}C. Porém, internamente verificaram-se variações muito menores. Tanto na cobertura verde quanto no terraço as variações diárias oscilaram entre 1,1 ^{0}C e 2,4 ^{0} C. A temperatura interna da câmara da cobertura com vegetação manteve-se sempre inferior à temperatura do terraço, sendo que nos dias de maior variação externa, a diferença entre elas também foi maior (em torno de 1,2 ^{0}C), tornando-se mínima (em torno de

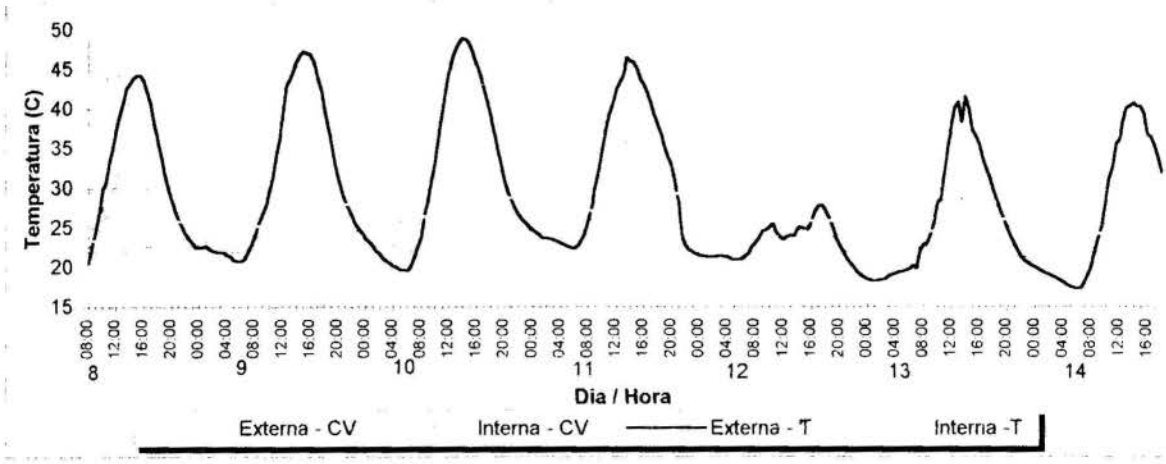


Figura 4 - Evolução de temperaturas superficiais externas e internas nas coberturas com vegetação e terraço

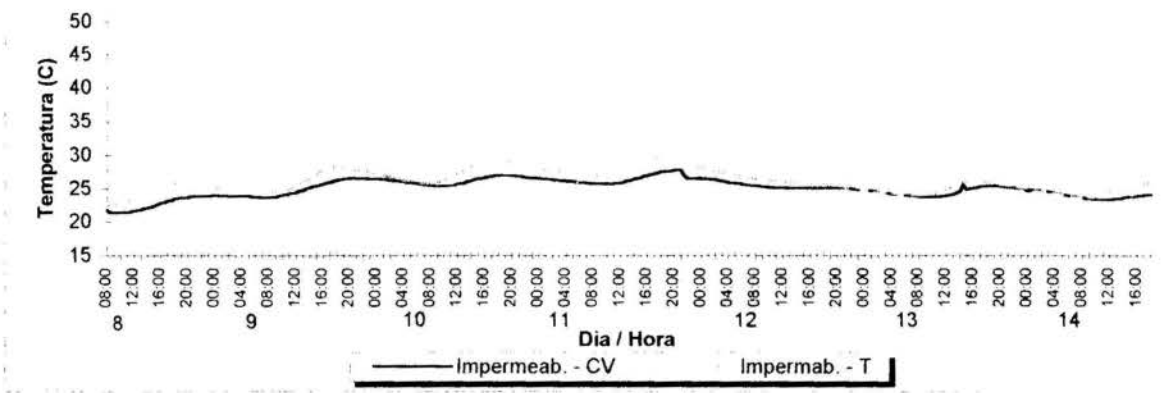


Figura 5 - Evolução da temperatura superficial na camada de proteção mecânica da impermeabilização nas duas coberturas

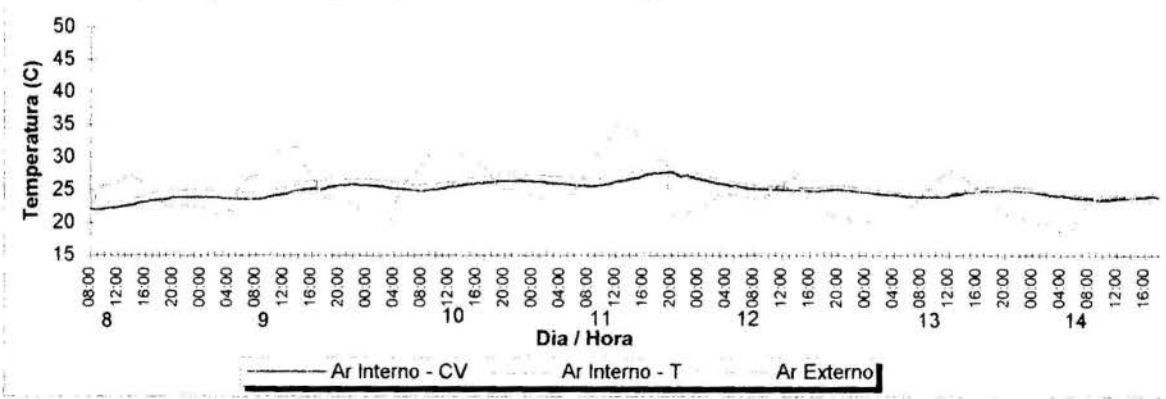


Figura 6 - Evolução das temperaturas do ar externo e interno às duas coberturas

0,5 ^{0}C), quando a variação da temperatura externa foi menor e associada a uma baixa radiação global diária. Os valores das propriedades térmica dos materiais (condutividade térmica, massa específica, calor específico e absortividade) estão relacionados na tabela abaixo, segundo valores encontrados na literatura.

Tabela 2 - Valores das propriedades térmicas adotadas

Material	Propriedades				Fonte
	K (W/mK)	ρ (kg/m^3)	c_p (J/kg K)	α	
Concreto armado	1,4	880	2400		Incropera
Argamassa cim/areia	0,72	1860	780		Incropera
Manta asfáltica	0,31	1125			Pirondi
Isofoan	0,029	36			Fabricante
Piso carâmico	0,46		837	0,65/ 0,80	Frota/ Nããs
Brita	1,81		837		ASHRAE/ Frota
Geotêxtil		100			Fabricante
Terra Vegetal	0,60	1800	1465		Frota
Grama				0,75/ 0,80	Ometto

CONCLUSÃO

Na condição de verão, ocorrente durante a realização do experimento, a cobertura com vegetação apresentou melhor resposta, já que as temperaturas superficiais e interna sob esta cobertura foram sempre menores.

Na cobertura com terraço, registrou-se um grande amortecimento, devido à quantidade de isolamento térmico utilizado. Desta forma, a temperatura interna sob esta cobertura registrou pequenas variações e valores próximos ao da cobertura com vegetação. Na maioria dos terraços, onde, ou não é usado nenhum isolamento ou é empregado isolamento insuficiente, as variações internas certamente são mais acentuadas e a temperatura interna bem mais elevada.

Uma maior ou menor vida útil do material impermeabilizante está diretamente ligada ao gradiente térmico a que este esta submetido; da mesma forma, a variação térmica nas lajes de cobertura é a principal causa de patologias. Assim, a presença de isolamento térmico é de fundamental importância nas coberturas planas. As próprias camadas constituintes da cobertura verde exercem este papel, minimizando as variações térmicas tanto na impermeabilização como na laje de cobertura. Em terraços, como as temperaturas superficiais externas são bem mais elevadas do que na vegetação, é imprescindível o uso de isolamento térmico.

A cobertura com vegetação é uma alternativa para coberturas planas, podendo proporcionar um espaço de lazer e contemplação diferenciado, além de garantir um bom isolamento térmico desta cobertura.

ABSTRACT

This work studies the thermal performance of two types of flat roofs: a green roof and a well insulated common flat roof. Both were monitored under summer conditions. The high values of surface temperature found on the common flat roof, stress the necessity of the use of thermal insulation on this type of construction. The obtained data have also shown the better thermal response of the green roof, as indicated by the lower temperatures shown by both surface and internal temperatures.

REFERÊNCIAS

ASHRAE Handbook of Fundamentals, 1981, American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, pp 23.12 -23.32.

Frota, A. B. e Schiffer, S. R., 1992, "Manual de Conforto Térmico", Editora Nobel S.A., São Paulo, SP.

Harazono, Y. et. al, 1990/91, "Effects of Rooftop Vegetation using Artificial Substrates on the Urban Climate and the Thermal Load of Buildings", *Energy and Buildings*, Vol. 15-16, pp 435-442.

Hawashima, S., 1990/91, "Effect of Vegetation on Surface Temperature in Urban and Suburban Areas in Winter", *Energy and Buildings*, Vol. 15-16, pp 465-469.

Honjo, T. e Takakura, T., 1991/91, "Simulation of Thermal Effects of Urban Green Areas on their Surrounding Areas", *Energy and Buildings*, Vol. 15-16, pp 443-446.

Hoyano, A., 1984, "Effects of Rooftoop Turf-planting Layers upon Building Thermal Environment", *Memoirs of the Faculty of Engineering*, Kyushu University, Vol. 44, N^0 2.

Hoyano, A., 1988, "Climatological Uses of Plants for Solar Control and the Effects on the Thermal Environment of a Building", *Energy and Buidings*, Vol. 11, pp 181-199.

Incropera, F. P. e Witt, D. P., 1992, "Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa", Editora Guanabara Koogan S.A., Rio de Janeiro, RJ.

Lamberts, R., 1983, "Desempenho Térmico de Coberturas Leves com Ático: Bancada de Testes e Modelo Matemático", Dissertação de mestrado - Curso de Pós-graduação em Engenharia Civil. UFRGS, Porto Alegre.

Meier, A. K., 1990/91, "Strategic Landscaping and Air-conditioning Savings: A Literature Review", *Energy and Buildings*, Vol. 15-16, pp 479-486.

Nããs, I. A., 1989, "Princípios de Conforto Térmico na Produção Animal", Ícone Editora, São Paulo.

Ometto, J. C., 1981, "Bioclimatologia Vegetal", Editora Agronômica Ceres Ltda., São Paulo.

Pirondi, Z., 1979, "Manual Prático da Impermeabilização e de Isolação Térmica", SBR - Editora e Artes Gráficas Ltda, São Paulo, SP.

Saito, I. et. al., 1990/91, "Study of the Effect of Green Areas on the Thermal Environment in an Urban Area", *Energy and Buildings*, Vol.15-16, pp 493-498.

Wilmers, F., 1990/91, "Effects of Vegetation on Urban Climate and Buildings", *Energy and Buildings*, Vol. 15-16, pp 507-514.

Zanesco, I., 1991, "Análise e Construção de um Piranômetro Fotovoltaico", Dissertação de mestrado, Curso de Pós-graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS, Porto Alegre.

SIMULATION, BY THE NETWORK METHOD, OF THE HEAT CONDUCTION THROUGH A COMPOSITE WALL, UNDER PERIODIC BOUNDARY CONDITIONS

Francisco Alhama, Juan F. López-Sánchez, Mariano Alarcón, Carlos F. González-Fernández[1]

Departamento de Física. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales.
Campus de Cartagena. Universidad de Murcia. Paseo Alfonso XIII, 48.
30271 Cartagena (Murcia), España

SUMMARY

The network method is a very useful alternative to other analysis methods of the transient thermal behaviour in composite walls, because it is a versatile, accurate and powerful method. Here, this approach has been applied to a three layer wall, with variable thermal conductivity. The boundary conditions on the external sides are: i) periodic radiative incident heat flux, ii) natural convection with surrounding air, which temperature varies periodically, iii) thermal radiation to the background sink.

INTRODUCTION

Systems with composite walls are usual in many technical applications and, specially, in civil engineering. Walls of buildings are conformed by layers of different materials with specific thermal properties; the outdoor temperature is variable and, generally, the indoor temperature is maintained constant to satisfy comfort requirements. Then, analysis of time-dependent behaviour is necessary to estimate cooling and heating loads of buildings, which are required for air conditioning design.

Considerable amount of work related with this topic exists, incorporating the influence of the daily cycle of the outdoor conditions, the incident solar radiation on the outdoor wall surface and the heat transfer by convection at the external and internal surfaces (Al-Mujahid and Zedan, 1990; Antonopoulos and Valsamakis, 1993 a; Antonopoulos and Democritou, 1993). In this work we are interested in investigating the conduction in a composite wall with polynomial dependent temperature conductivity, which is a precise aproximation in many materials. Initially the wall is isothermal and at the same temperature as its initial natural environment one's, which has a periodic temporal variation. The boundary condition at the outdoor surface of the wall is a periodic thermal radiative heat flux, countered by natural convection with the surrounding air, and also radiant exchange with the background radiation sink. On the indoor surface of the wall, energy is also transferred from or to the inside environment by natural convection.

This investigation is carried out using the network method, an useful alternative to the general numerical methods to obtain the transient thermal response of complex systems. This method is based on Peusner's (1987) and Oster's et al. (1971) works, and allows the description of any transport process in terms of electrical networks. In this way, and from the equivalent electrical model, it is possible to obtain digitally all of the output signals by an adecuated simulation program of electrical circuits. The spatial variable in the heat conduction equations is discretized as in finite-difference schemes but the time variable remains continuous. It allows the mathematical model to be described by a network model, transforming the partial differential equations involved in the conduction problems into a set of coupled ordinary differential equations, which are the equations of the network. Highly developed methods of circuit analysis may then be employed to obtain the dynamic behaviour of systems without having to deal explicitly with the usually very complex differential equations describing the process. We have found that the simulation program PSPICE (Nagel, 1977) is very useful for this purpose.

The network approach is a very powerful method to deal with transport processes; it has already been applied successfully in phenomena such as diffusion, convection and electromigration through membranes and electrode reactions with coupled chemical reactions (Horno et al., 1992; González-Fernández et al., 1995). Although the electro-thermal analogy is very well known, it has been only used from a formal point of view or to make very limited analogue systems, because of its inherent tolerance ranges. Nevertheless, the network method, considering the formal equivalence, intends to simulate the behaviour of the systems but avoiding the limitations that the physical implementation of any circuit has. In this way, this approach, working with ideal monoports, is very versatile, can simulate conditions of difficult or not possible empirical accessibility, and take advantage of the potential that the modern simulation programs of electrical circuits have. From a more specific point of view, the network method admits different distribution of initial temperatures, boundary conditions functions of the time or the temperature, and variable thermal properties, in a routine way, so enclosing a great variety of heat transfer nonlineal problems.

NETWORK MODEL

A one-dimensional wall constituted by three layers has been considered. The first layer I, of thickness L_1, has a temperature-dependent thermal conductivity, and the second layer II, of thickness L_2, is made of an insulating material; L_3 is the thickness of the layer III. Heat fluxes of incident solar radiation, natural convection and re-radiation through the external surface of layer I have been supposed; only natural convection on indoor surface has been considered.

The diffusion equations are

[1] To whom correspondence should be addressed.

$$\rho_I c_I(\partial T/\partial t) = \partial (k_I \partial T/\partial x)/\partial x\ ;\ t>0,\ 0 < x \le L_1 \quad (1)$$
$$\rho_{II} c_{II}(\partial T/\partial t) = k_{II}\partial^2 T/\partial x^2\ ;\ t>0,\ L_1 < x < L_1+L_2 \quad (2)$$
$$\rho_{III} c_{III}(\partial T/\partial t) = k_{III}\partial^2 T/\partial x^2\ ;\ t>0,\ L_1+L_2 < x < L \quad (3)$$

where x and t are the space and time, respectively, ρ is the density, c the specific heat and L the total width. The thermal conductivity k_I varies with the temperature in the form

$$k_I = k_{I0} + k_{I1}T_I + k_{I2}T_I^2 + \ldots \quad (4)$$

where k_{I0}, k_{I1}, k_{I2} ... are constants as well as k_{II} and k_{III}

Moreover,

$$T_I(x = L_1, t) = T_{II}(x = L_1, t) \quad (5)$$

$$T_{II}(x = L_1 + L_2, t) = T_{III}(x = L_1 + L_2, t) \quad (6)$$

must be fulfilled to satisfy boundary requirements between adjacent layers. The boundary condition at x = 0 is:

$$j_{x=0} = -k_I(\partial T/\partial x)_{(0,t)} = h_o(T_{x=0} - T_a) + j_r + \varepsilon\sigma(T^4_{x=0} - T^4_\infty) \quad (7)$$

where h_o is the heat transfer coefficient of the surface, T_a and T_∞ are the ambient fluid and radiation sink temperatures, ε is the radiative emissivity of surface, σ is the Stefan-Boltzmann constant and j_r is the solar incident heat flux. Daily variation of this flux has been assumed in the form:

$$j_r = j_o \operatorname{sen}(2\pi t/\tau), \quad \text{for} \quad 0 \le t \le \tau/2 \quad (8)$$

and

$$j_r = 0, \quad \text{for} \quad \tau/2 \le t \le \tau \quad (9)$$

τ being the period of the incident heat flux. The same period has the variations of the ambient air temperature T_a, that may be approximate as (Antonopoulos y Democritou, 1995)

$$T_a = T_m + T_n \operatorname{sen}(2\pi t/\tau) \quad (10)$$

where T_m and T_n are the mean value and the amplitude of the temperature oscillations, respectively.

The boundary condition at x = L, can be established as:

$$j_{x=L} = -k_{III}(\partial T/\partial x)_{(L,t)} = h_L(T_{x=L} - T_m) \quad (11)$$

where h_L is the heat transfer coefficient of the surface with the indoor air, which temperature is T_m.

The initial condition is given by

$$T(x, 0) = T_o \quad (12)$$

The general procedure for obtaining the network model representative of a transport process consists in dividing the physical region of interest into volume elements. So, for the compartment i, of thickness Δx, according to the Fourier's law, the Eq. (1), layer I, can be written as

$$\rho_I c_I (dT_i/dt) = -\Delta j/\Delta x = (j'_{i-\Delta} - j'_{i+\Delta})/\Delta x \quad (13)$$

$j'_{i\pm\Delta}$ being the fluxes leaving and coming the compartment i,

$$j'_{i\pm\Delta} = \pm k_{i\pm\Delta}(T_i - T_{i\pm\Delta})/(\Delta x/2) \quad (14)$$

Using Eq.(14), Eq.(13) is given by

$$\rho_I c_I (dT_i/dt) = \\ = (1/\Delta x)[k_{i-\Delta}(T_{i-\Delta} - T_i)/(\Delta x/2) - k_{i+\Delta}(T_i - T_{i+\Delta})/(\Delta x/2)] \quad (15)$$

$T_{i\pm\Delta}$ and T_i being the temperatures at the ends and at the central point of the compartment i, respectively (Fig. 1). The conductivity $k_{i\pm\Delta} = k(T_{i\pm\Delta})$ are the values of k_I at those ends. Substituting Eq. (4) into Eq. (15) yields the following equation:

$$\rho_I c_I \Delta x(dT_i/dt) = \\ = (T_{i-\Delta} - T_i)/(\Delta x/2k_{I0}) + 2(T_{i-\Delta} - T_i)[(k_{I1}/\Delta x)\, T_{i-\Delta} - \\ - (T_i - T_{i+\Delta})/(\Delta x/2k_{I0}) - 2(T_i - T_{i+\Delta})\,[(k_{I1}/\Delta x)\, T_{i+\Delta} \quad (16)$$

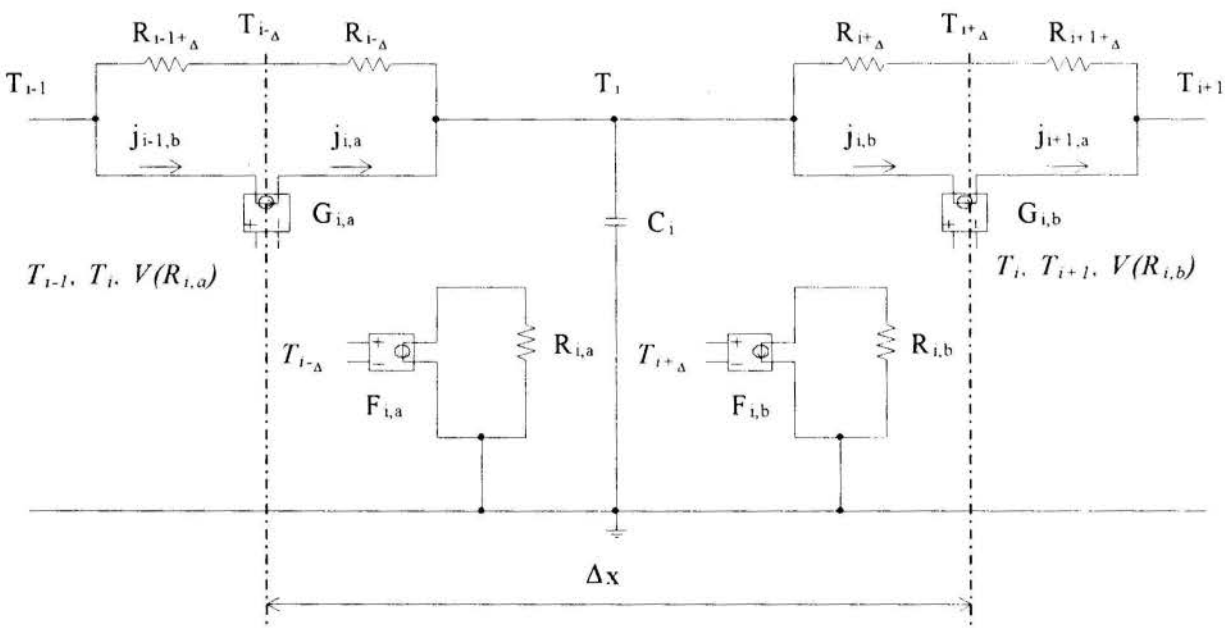


Figure 1 - Network model for transient heat conduction in a volume element of the layer I, with temperature-dependent thermal conductivity.

where $k_{I2}, k_{I3}, \ldots = 0$ to simplify.

This equation can be written as

$$j_{i-\Delta} - j_{i+\Delta} - j_{i_\tau} + j_{i,a} - j_{i,b} = 0 \tag{17}$$

where

$$j_{i\pm\Delta} = \pm (T_i - T_{i\pm\Delta}) / (\Delta x / 2k_{I0}) \tag{18}$$

$$j_{i_\tau} = \rho_I c_I \Delta x \, (dT_i / dt) \tag{19}$$

$$j_{i,a} = 2(T_{i-\Delta} - T_i) \, [(k_{II}/\Delta x) \, T_{i-\Delta} \tag{20}$$

$$j_{i,b} = 2(T_i - T_{i+\Delta}) \, [(k_{II}/\Delta x) \, T_{i+\Delta} \tag{21}$$

Eq. (17) can be considered as a Kirchhoff's current law, and the temperature T as a variable satisfying Kirchhoff's voltage law, because of T is a continuous and single-valued variable. Then, it is possible to analyse the heat conduction process by an electric network which characteristic variables are j and T. In this sense, Eqs. (18-21) define resistors with resistance $R_{i\pm\Delta} = \Delta x / 2k_{I0}$, a capacitor with capacitance $C_i = \rho_I c_I \Delta x$, and two multivariable voltage-dependent current sources $G_{i,a}$ and $G_{i,b}$, of output $j_{i,a}$ and $j_{i,b}$ respectively, which are connected as the Kirchhoff's current law, Eq. (17). Moreover, according to the topology, $T_{i-\Delta} \equiv T_{i-1+\Delta}$, $T_{i+\Delta} \equiv T_{i+1-\Delta}$, and $|j_{i-\Delta}| \equiv |j_{i-1+\Delta}|$, $|j_{i+\Delta}| \equiv |j_{i+1-\Delta}|$; consequently, $(T_{i-\Delta} - T_i) = (T_{i-1} - T_{i-1+\Delta})$, $(T_i - T_{i+\Delta}) = (T_{i+1-\Delta} - T_{i+1})$, and from Eqs. (20, 21), $|j_{i,a}| = |j_{i-1,b}|$, and $|j_{i,b}| = |j_{i+1,a}|$. In this way, it results that the sources $G_{i,a}$ and $G_{i,b}$ can be connected between the points i-1 and i, and i and i+1, respectively, as it is shown in Fig.1.

The voltage-dependent current source $G_{i,a}$ is controlled by two functions, $V_{i,a}^{*} = (T_{i-\Delta} - T_i)$ and $V_{i,a}^{**} = 2(k_{II}/\Delta x) \, T_{i-\Delta}$. The first, $V_{i,a}^{*}$, is obtained directly on its associated nodes, while $V_{i,a}^{**}$ is evaluated by other auxiliary circuit with a voltage-dependent current source $F_{i,a}$, controlled by $T_{i-\Delta}$, of output $V_{i,a}^{**}$, and the resistor $R_{i,a} = 1$. In the same way, the implementation of $G_{i,b}$ needs an auxiliary circuit with the voltage-dependent current source $F_{i,b}$, of output $2(k_{II}/\Delta x) T_{i+\Delta}$, and the resistor $R_{i,b} = 1$. The other control voltage for $F_{i,b}$, $(T_i - T_{i+\Delta})$, is obtained again directly from the circuit.

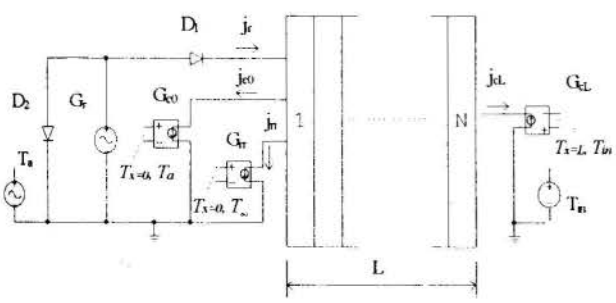


Figure 2 - Network model for transient heat conduction in the entire physical region. Boundary and initial conditions are explicit in the model. Auxiliary circuits are not included. j_{c0} and j_{cL} are the convective fluxes at x = 0 and x = L, respectively; j_{rr} is the re-radiation flux.

The branches of the circuit corresponding to the layers II and III are the same that that of the layer I, without the current sources $G_{i,a}$ and $G_{i,b}$ and their auxiliary circuits, because k_{II} and k_{III} are constants. For network modelling purposes, any number N_1, N_2 and N_3 of elemental circuits as those described, corresponding to the layers I, II and III, must be connected in series to form the network model for the entire physical region undergoing the transient heat conduction process. Fig. 2 shows the entire ladder network model. The next step is to include initial and boundary conditions; initial temperatures throughout the system have been incorporated by means of the initial potential of the capacitors C_i in the network model. The incident radiant heat flux, Eq. (8), is modelled by a sinusoidal variable current source G_r, of output j_r. Eq. (9) is satisfied by the diodes associated to source G_r, which constitutes a typical half-wave rectifier circuit. The heat fluxes of the natural convection at x =0 and x = L, are modelled by the voltage-dependent current sources G_{c0}, controlled by the voltages $T_{x=0}$ and T_a, and G_{cL}, controlled by the voltages $T_{x=L}$ and T_{in}; the outputs of these sources are $h_o(T_{x=0} - T_a)$ and $h_L(T_{x=L} - T_a)$, respectively, Eq. (7). The temporal variation of the ambient air temperature, Eq. (10), has been modelled by a variable voltage source of output T_a, (Fig.2). The heat flux exchanged with the background radiation sink at x=0, is also implemented in the network model by the voltage-dependent current source G_{rr}, of output $\varepsilon\sigma(T^4_{x=0} - T^4_\infty)$, (Fig.2), where T_∞ is modelled by a simple auxiliary circuit as T_a was.

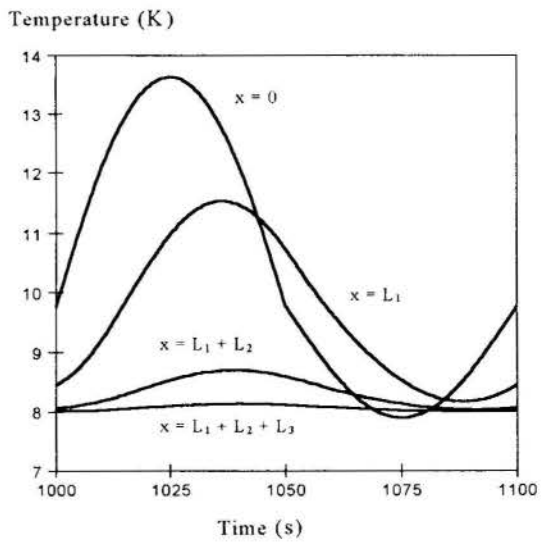
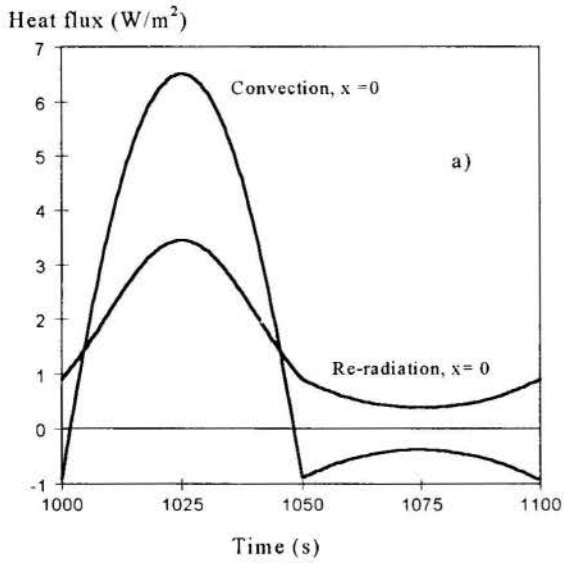


Figure 3. Temporal profiles of temperatures at the limits of the layers.

NUMERICAL RESULTS

The implementation of the network model of Fig. 2 into an electrical network simulation routine such as PSPICE allows us to obtain the theoretical response expected for the system considered. The digital simulation of the behaviour of a layered wall, under the conditions specified by the mathematical model, has been carried out using the following values of the parameters: $c_I = c_{III} = 1$ J/kg·K, $c_{II} = 0.5$ J/kg·K, $\rho_I = \rho_{III} = 1$ kg/m^3, $\rho_{II} = 0.5$ kg/m^3, $k_{I0} = 10^{-3}$ W/m·K, $k_{II} = 10^{-4}$ W/m·K^2, $k_{II} = 25 \cdot 10^{-5}$ W/m·K, $k_{III} = 2.5 \cdot 10^{-3}$ W/m·K, $L_1 = 0.25$ m, $L_2 = 0.05$ m, $L_3 = 0.1$ m, $N_1 = 25$ cells, $N_2 = 5$ cells, $N_3 = 10$ cells, $h_o = 4$ W/m^2·K, $h_L = 0.1$ W/m^2·K, $\varepsilon\sigma = 10^{-4}$ W/m^2·K^4, $j_o = 10$ W/m^2, $\tau = 100$ s, $T_m = 10$ K, $T_n = 2$ K, $T_o = 10$ K, $T_{in} = 8$ K, $T_\infty = 0$ K. Obviously, these values do not correspond to real characteristics, because our aim has been to show several influences on the thermal response of the system, including alinealities, and the capacity of the network method to model them. Simulations are carried out on a SUN Sparcstation 2, 4/50 GX.

Even if the total response of the model, transitory as well as armonic stationary, has been supplied by PSPICE, it has been selected a complete cycle that begins in $t = 10\ \tau = 1000$ s, in order to eliminate transitory influences on the graphics. The location of the points to represent temperature or fluxes has been selected as typical.



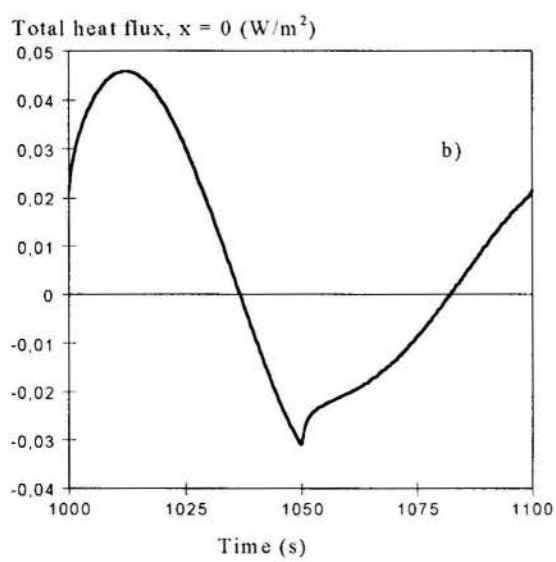


Figure 4 - a) Temporal variations of the convective and re-radiative instantaneous heat fluxes through the external surface. b) Temporal dependence of the total heat flux through the external surface.

Figure 3 shows the temporal dependence of the temperature at $x = 0$, L_1, L_1+L_2, $L_1+L_2+L_3$. It can be observed that the larger time lag between consecutive maximums corresponds to the limits of the layer II, where the isolation character takes place. Market singularities of the curve x=0, at the beginning and center of each cycle, are due to strong discontinuities of incident solar radiation at these moments. The temperature at the outdoor surface, in absence of solar radiation, goes down to values smaller than the external air temperature, due to re-radiation.

Temporal variations of convective and re-radiative instantaneous heat fluxes through the external surface are shown in Fig. 4.a), which by the reason mentioned before have also singularities; temporal dependence of total heat flux through the external surface is shown in Fig. 4.b). The evolution of the heat flux through indoor surface, which is of interest for air conditioning purpose, is given in Fig. 5.

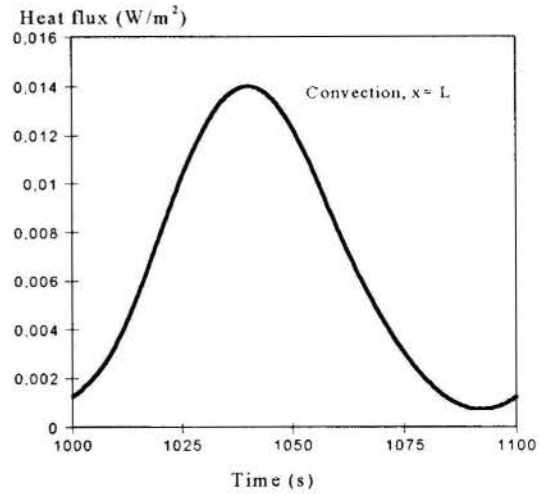


Figure 5 - Temporal evolution of the heat flux through indoor surface.

Computing time depends on the maximum time required at the process; for $t = 12\ \tau$ is 600 s.

REFERENCES

Al-Mujahid, A and Zedan, M. F., 1990, "Transient heat-conduction response of a composite plane wall", *Waerme- & Stoffuebertrag*, Vol. 26, pp. 33-39.

Antonopoulos, K. A. and Valsamakis, S. P., 1993a, "Effects of indoor and outdoor heat-transfer coefficients and solar absorptance on heat flow through walls", *Energy*, Vol. 18, pp. 259-271.

Antonopoulos, K. A. and Democritou, F., 1993, "Correlations for the maximum transient non-periodic indoor heat flow through 15 typical walls", *Energy*, Vol. 18, pp. 705-715.

Antonopoulos, K. A. and Democritou, F., 1995, "Experimental and numerical determination of a new wall-heat - gain function", *International Journal Energy Research*, Vol. 19, pp. 103-116.

González-Fernández, C. F., García-Hernández, M. T. and Horno, J., 1995, "Computer simulation of a square scheme with reversible and irreversible charge transfer by the network method", *Journal of Electroanalytical Chemistry*, Vol. 395, pp. 39-44.

Horno, J., Castilla, J. and González-Fernández, C. F., 1992, "A New Approach to Nonstationary Ionic Transport Based on the Network Simulation of Time-Dependent Nerst-Planck Equations", *The Journal of Physical Chemistry*, Vol. 96, pp. 854-858.

Nagel, L. W., 1977, "SPICE: A Computer Program to Simulate Semiconductor Circuits", Memorandum UCB/ERL M382, Berkeley, University of California, CA.

Peusner, L., 1987, "The Principles of Network Thermodynamics. Theory and Biophysical Applications", (Reprint of 1971 Thesis). Entropy, Lincoln, Massachusetts.

Oster, G, Perelson, A. and Katchalsky, A., 1971, "Network Thermodynamics", *Nature*, Vol. 234, pp. 393-399.

DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES RELACIONADAS À TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM TELHAS CERÂMICAS

André Duarte Bueno **José A. Bellini da Cunha Neto**

LMPT - Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Santa Catarina - 88 040-900 - Florianópolis - SC

RESUMO

Determinam-se propriedades físicas relacionadas à transferência de massa (umidade) em telhas cerâmicas. São apresentados os ensaios de densidade, porosidade, conteúdo mássico na saturação, adsorção, porosimetria a mercúrio e permeabilidade ao vapor. Apresenta-se ainda a difusividade ao vapor da telha cerâmica, e os trabalhos futuros que poderão ser desenvolvidos utilizando-se microscopia eletrônica e análise de imagens.

INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, principalmente depois da crise energética da década de 70, foram desenvolvidos muitos trabalhos de transferência de calor em edificações, objetivando inicialmente, a redução do consumo energético provocado pelo uso de equipamentos de condicionamento de ar. Posteriormente considerou-se a melhoria das condições térmicas da edificação (conforto ambiental).

Os problemas térmicos são maiores em regiões com climas quentes, com alta incidência da radiação solar. Nestas regiões, identificou-se que é na cobertura que ocorrem os maiores fluxos de calor para a edificação e como as telhas são os elementos que estão diretamente em contato com o meio ambiente (chuva, sol), é fundamental melhorar as propriedades relacionadas à transferência de calor neste material.

Lamberts (1983), descreve duas formas de se minorar os problemas de desconforto térmico em edificações: de forma ativa, com a utilização de equipamentos de condicionamento de ar; e de forma passiva, tirando partido das cartacterísticas térmicas da estrutura. Nesta última, destacam-se: a *ventilação natural*, que objetiva reduzir os fluxos de calor, pelo mecanismo de remoção por convecção do calor absorvido; A utilização de *materiais isolantes*, como o isopor e a lã de vidro, que têm o objetivo de reduzir o fluxo de calor por condução; A *barreira à radiação*, que consiste de uma película de metal polido colocada abaixo das telhas. O metal polido tendo baixa emissividade, reduz a transferência de calor por radiação da telha para o forro. Em coberturas pesadas pode-se utilizar a *capacidade térmica* da estrutura para controlar, através do retardo térmico, o fluxo de calor para o interior da edificação.

No Brasil, diferentemente dos países europeus, as técnicas de redução dos fluxos de calor nas coberturas, normalmente não são usadas. Seja pelo maior custo inicial das técnicas naturais, seja pelo desconhecimento destes mecanismos pelo usuário final. Espera-se que com o desenvolvimento de normas relacionadas aos problemas térmicos das edificações as construtoras e engenheiros passem a aplicar as técnicas acima citadas (Lamberts, 1991).

Com relação à especificação dos elementos constituintes das coberturas, o usuário só seleciona o tipo de telha. Tendo a telha de cerâmica maior aceitação, o usuário final 'sabe' que a telha de cerâmica deixa a sua casa mais 'fresca'.

Embora já exista um grande avanço nos estudos de transferência de calor em edificações, falta ainda a consideração dos efeitos das trocas de massa nos elementos construtivos, fator normalmente desconsiderado. O presente trabalho é uma contribuição aos estudos de transferência de massa, e objetiva determinar as propriedades físicas relacionadas à transferência de massa em telhas cerâmicas.

Pretende-se através da determinação das propriedades da telha cerâmica, do uso de simulações numéricas (Bueno e Philippi, 1996) e da realização de ensaios de campo (Bueno, Lam-berts e Cunha Neto, 1996), desenvolver especificações para o desenvolvimento de uma nova telha de cerâmica, mais adaptada ao clima regional (sub-tropical).

BALANÇO DE CALOR E UMIDADE

Admite-se, como senso comum, que as telhas cerâmicas apresentam um desempenho térmico superior em relação às de fibrocimento; mas quais os fenômenos físicos que explicam este comportamento? Nas linhas abaixo procura-se descrever de uma forma simplificada o processo de transferência de massa em telhas expostas ao meio ambiente.

Durante a noite as telhas perdem energia por radiação em ondas longas para o céu, figura 1(a). Com a perda de energia, a temperatura da telha fica mais baixa que a temperatura do ar, acarretando uma redução na pressão de saturação do vapor junto à superfície da telha; passa então a existir um gradiente de pressão de vapor entre a telha e o ar; e a telha passa a ganhar umidade por condensação. As telhas de cerâmica são porosas, permitindo a migração desta umidade para o seu interior.

Pela manhã, a telha está com concentração de umidade alta em seu interior e, com a incidência da radiação solar, o processo se inverte. A telha ganha energia e eleva a sua temperatura; conseqüentemente, ocorre aumento da pressão de vapor na superfície da telha, passando esta a perder umidade. Como parte da energia do sol está sendo utilizada para evaporar a umidade in-

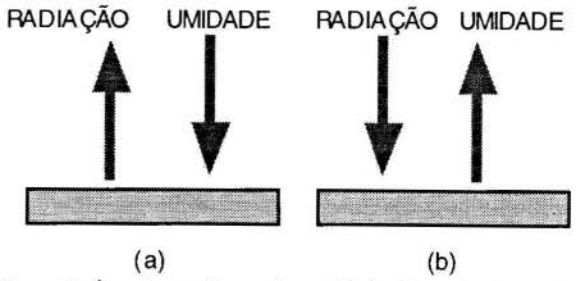


Figura 1: À noite a telha ganha umidade (a), e de dia perde umidade (b).

corporada na noite anterior, a temperatura da telha de cerâmica fica abaixo da que estaria se não houvesse evaporação, figura 1(b).

O que explica o melhor desempenho térmico da telha permeável (como a telha de cerâmica) em relação as impermeáveis é então, o processo de interação da estrutura porosa da telha com a umidade do ar.

Deve-se considerar ainda a chuva, que é a precipitação de água líquida diretamente sobre a telha, sem que ocorra mudança de fase. Como no processo de evaporação ocorre absorção de calor latente, o ganho de desempenho térmico decorrente da porosidade das telhas será maior com as chuvas.

Lamberts (1983) identificou a importância da transferência de umidade em telhas de cerâmica e através de cálculos simplificados quantificou que a energia gasta na evaporação da umidade incorporada à noite equivale a 20% da radiação solar incidente. Dando continuidade a este trabalho, (Bueno, Philippi e Lamberts, 1992) discutem o fenômeno da transferência de calor e umidade em telhas de argamassa, utilizando processo simplificado, em que se considera as trocas de umidade entre a telha e o meio ambiente, mas se desconsidera a resistência hidráulica da telha.

O processo de retenção da umidade do ar pela telha no período noturno, e posterior evaporação desta umidade está associado a duas propriedades do material. A primeira, é a capacidade de retenção da umidade, representada pela curva de adsorção do material. A curva de adsorção relaciona a umidade relativa do ar ambiente com o conteúdo de umidade retido pelo material no equilíbrio térmico e mássico. As isotermas de adsorção juntamente com modelos teóricos de adsorção física, têm sido usados ainda na determinação da estrutura porosa. A adsorção está ligada essencialmente à estrutura porosa do material (distribuição de diâmetros e volumes de poros). A segunda propriedade é a capacidade de penetração da umidade que condensa sobre a sua superfície para o seu interior (permeabilidade). O processo de migração depende da difusividade do material, que é dividida para efeitos teóricos em difusividade térmica e mássica. A permeabilidade depende, além da porosidade, da conectividade entre os poros.

A figura 2 apresenta uma ampliação idealizada da estrutura porosa de materiais cerâmicos. A telha de cerâmica apresenta uma distribuição de poros extensa, com poros condensáveis (poros facilmente preenchidos por líquido). Nos poros não preenchidos por líquido ocorre transferência de vapor por difusão, enquanto nos preenchidos, as trocas de líquido ocorrem por condensação, migração capilar e evaporação. Para a compreensão dos processos higroscópicos que se desenvolvem na telha de cerâmica (meio poroso) parte-se dos trabalhos de Philip e De Vries (1957), De Vries (1958,1987), Philippi et alii(1993), Fernandes (1990), Yunes (1992), e Cunha Neto (1992).

ENSAIOS

Com o objetivo de determinar as propriedades físicas relacionadas a transferência de massa nas telhas, foram realizados os ensaios de densidade e porosidade, o ensaio de adsorção, o ensaio de porosimetria a mercúrio e o ensaio de permeabilidade ao vapor.

Material: As telhas utilizadas nos ensaios são telhas cerâmicas do tipo plan, formadas por capa e canal e foram obtidas em uma olaria da região da Grande Florianópolis-SC.

Ensaio de Densidade e Porosidade. Para obtenção da massa das amostras foi utilizada uma balança analítica marca Sartórius, de resolução 0.0005g, com faixa de operação para até 160g; uma estufa com faixa de operação até 100°C para secagem das amostras; e uma bureta graduada (escala 50 ml) para medição de volume.

As amostras foram impermeabilizadas com tinta impermeabilizante marca comercial Hidronorte, e seu volume determinado conjuntamente na bureta graduada por imersão. Também foi determinado o conteúdo mássico na saturação, w_{sat}, que é a relação da massa de líquido retida na amostra saturada, pela massa seca da amostra.

Os resultados encontrados (média de 10 amostras) foram:

- **Densidade = 1 880 +/- 80 [kg/m³];**
- **w_{sat}= 0.176 +/- 0.001 [kg/kg];**
- **Porosidade = 0.331+/- 0.014 [m³/m³].**

Ensaio de Adsorção. O ensaio de adsorção consiste em se determinar a relação de equilíbrio entre a umidade relativa do ar e o conteúdo mássico de umidade do material a uma determinada temperatura, veja Merouani (1987), Yunes (1993) e Cunha Neto (1992).

Este experimento utiliza um conjunto de reservatórios executados em resina que conterão as amostras, atados a um fio que permite pesá-los sem sua retirada do dessecador. O dessecador usado consiste de um frasco de conserva, com tampa vedada por uma junta de borracha e volume adequado (0.5 litros). A atmosfera dentro do dessecador, mantido a temperatura constante, tem sua umidade relativa controlada por uma solução salina supersaturada.

As amostras foram selecionadas aleatoriamente, secas em estufa e pesadas para se obter as massas secas. Em seguida foram

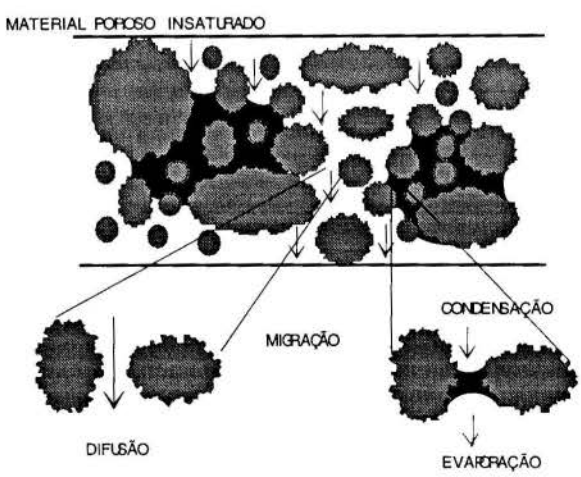


Figura 2: Transferência de umidade em telha de cerâmica.

Figura 3: Dessecador e amostras do ensaio de adsorção.

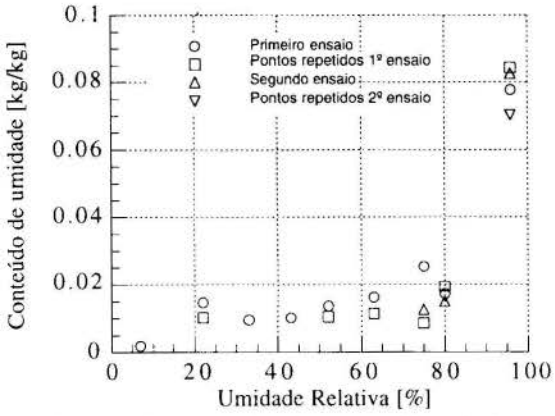


Figura 4. Curva de adsorção para a telha crâmica.

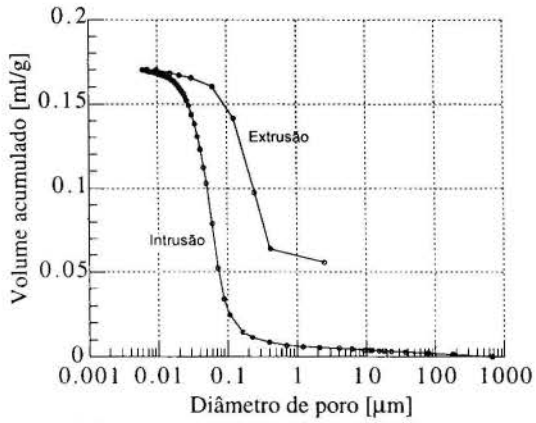


Figura 5. Volume acumulado em função do diâmetro dos poros.

colocadas dentro dos dessecadores e os conjuntos mantidos a 30°C em estufa. A determinados períodos as massas das amostras são adquiridas. O fim do ensaio é determinado quando não se detecta mais variações de massa de uma semana a outra. Na figura 3 são mostrados o dessecador e as amostras utilizadas no ensaio de adsorção.

Resultados da adsorção. Foram realizados dois ensaios, para verificar a dispersão nos resultados. Como para valores altos de umidade relativa o ensaio é mais lento, foram obtidos dois pontos experimentais para h=96%. A figura 4 apresenta os resultados do ensaio de adsorção para a telha de cerâmica. O ponto correspondente a h=75% apresenta uma anomalia, o conteúdo mássico é menor que para h=60%, isto se deve provavelmente à utilização de um sal não P.A.

Ensaio de Porosimetria a Mercúrio. Um ensaio adicional que foi realizado, a porosimetria por injeção de mercúrio. Para compreensão do funcionamento da porosimetria a mercúrio veja J. Van Brakel (1982).

O equipamento utilizado foi um PORESIZER 9320 V2.05, da Micromeritics. Os valores de pressão aplicados na intrusão estão na faixa de 0.002 Mpa a 201 Mpa. Para a retração os valores foram 175.5 Mpa e 0.5 Mpa. Estes valores de pressão permitiram identificar poros de 660 μm a 0.0062 μm.

Resultados da porosimetria. A tabela 1 apresenta os principais resultados do ensaio de porosimetria a mercúrio.

A Figura 5 mostra o volume acumulado em função do diâmetro dos poros. Pode-se observar a histerese entre as curvas de injeção e retração do mercúrio.

O efeito de histerese esta associado a poros do tipo garganta, a conectividade do meio poroso (Souza, 1993) e a histerese em nível de poro (Everet and Haynes, 1972).

Para diâmetro de poro de 1.2μm, o volume acumulado é de 0.0059 ml/g na injeção contra 0.06 ml/g na retração, uma diferença de 0.0541 ml/g. A maior histerese ocorre para poros da ordem de 0.1 μm onde temos volumes de 0.0247 ml/g para injeção contra 0.145 ml/g na retração. Observa-se ainda um aumento considerável do volume acumulado na injeção para diâmetro de poro acima de 0.1μm, atingindo um volume acumulado de 0.1667 ml/g para diâmetro de poro de 0.01 μm. Ou seja a grande maioria dos poros esta compreendida de 0.1 μm a 0.01 μm.

Tabela 1: Resultados do ensaio de porosimetria a mercúrio

Volume máximo de mercúrio penetrado na amostra na intrusão	0.1702 ml/g.
Área total dos poros	14.791 m2/g.
Diâmetro médio do poro (volume)	0.0385 μm
Diâmetro médio do poro (área)	0.0579 μm
Densidade	1.8298 g/ml
Densidade aparente	2.6573 g/ml
Porosidade	31.14 %

A figura 6 mostra a superfície específica acumulada em função do diâmetro dos poros. Observa-se um incremento substancial da superfície acumulada para poros a partir de 0.1μm, atingindo um máximo de 14.79 m^2/g.

Outro parâmetro físico importante no estudo da transferência de massa em telhas, é a difusividade. De acordo com os conceitos da teoria de meios porosos de Philip e De Vries (1957), existem dois coeficientes de transporte, um associado aos gradientes de umidade e o outro a gradientes de temperatura. O coeficiente de transporte associado a gradientes de umidade (difusividade isotérmica), pode ser dividido em dois termos: difusividade da fase vapor e da fase líquida. O presente trabalho determina a difusividade isotérmica para a fase vapor.

Pode-se determinar a difusividade a partir dos resultados do ensaio de permeabilidade ao vapor e do ensaio de adsorção. Apresenta-se abaixo o ensaio de permeabilidade ao vapor e a determinação da difusividade das cerâmicas na região do vapor.

Ensaio de Permeabilidade ao Vapor. O objetivo deste ensaio é determinar a permeabilidade ao vapor da telha de cerâmica vermelha.

As amostras foram cortadas de uma telha com serra copo diamantada sob lubrificação com água para obtenção de um bom acabamento superficial. As amostras foram coladas com silicone sobre recipientes contendo a solução salina de maior umidade relativa. O conjunto é então colocado em um dessecador, feito de um frasco de vidro de 1.5 litros, contendo a solução salina de menor umidade relativa. A figura 7 mostra um esboço da montagem. Os dessecadores foram mantidos em estufa

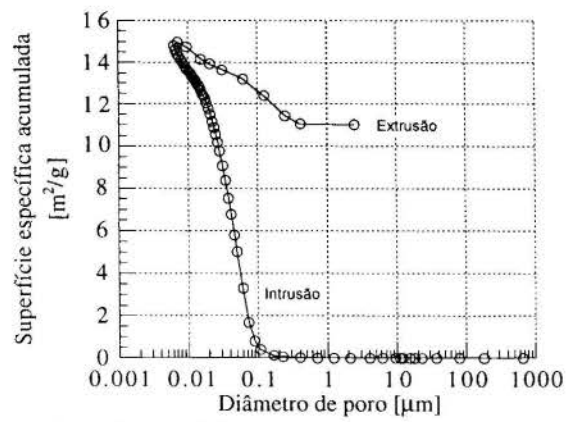


Figura 6. Superfície específica acumulada em função do diâmetro dos poros.

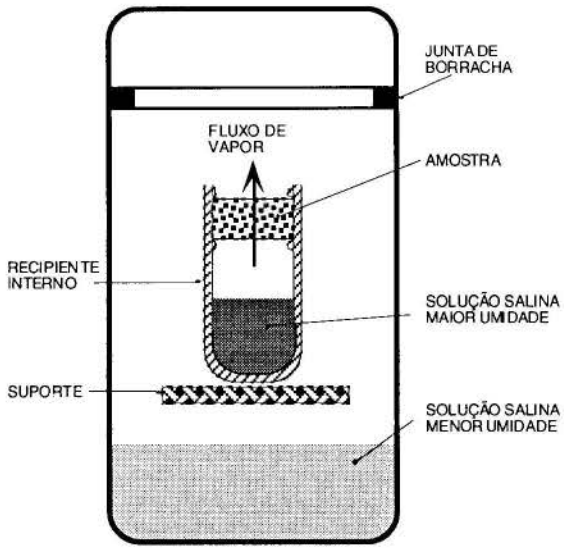


Figura 7. Montagem das amostras para o ensaio de permeabilidade ao vapor.

a 30°C.

Resultados do ensaio de permeabilidade ao vapor. A figura 8 apresenta a evolução da vazão em gramas/dia para o ensaio de permeabilidade ao vapor. O tempo total de ensaio foi próximo a 1 ano. O processo é extremamente lento, dado a baixa difusividade das cerâmicas e a grande espessura das amostras (11mm). Os pontos entre os dias 40 e 70 foram desconsiderados devido à ocorrência de uma variação de temperatura da estufa.

A velocidade do ensaio poderia ser aumentada pela redução da espessura da amostra. No entanto isto não é recomendável pois as superfícies da cerâmica apresentam uma estrutura porosa diferente de seu interior, em função do processo de prensagem e secagem das telhas. O lixamento removeria essa superfície descaracterizando o material.

Determinação da difusividade isotérmica de umidade. Com as curvas de permeabilidade ao vapor que fornecem o fluxo de massa j [g/dia] em função da diferença de umidade relativa e a curva de adsorção que relaciona o conteúdo de umidade (w) com a umidade relativa do ar, pode-se determinar a difusividade isotérmica de umidade da telha através da equação:

$$D_h = \frac{j}{\rho_l} \frac{\Delta x}{DR_{seca} \cdot \Delta w} \qquad (1)$$

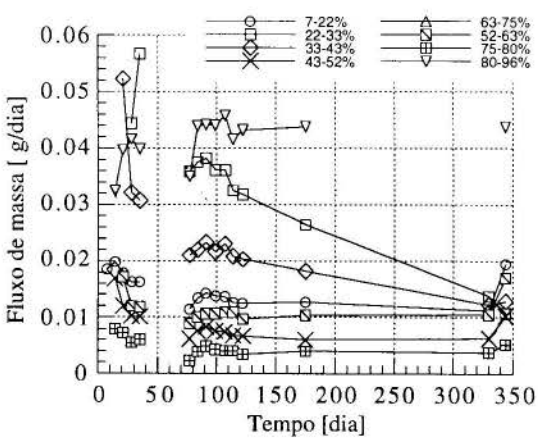


Figura 8. Curvas de permeabilidade da telha de cerâmica.

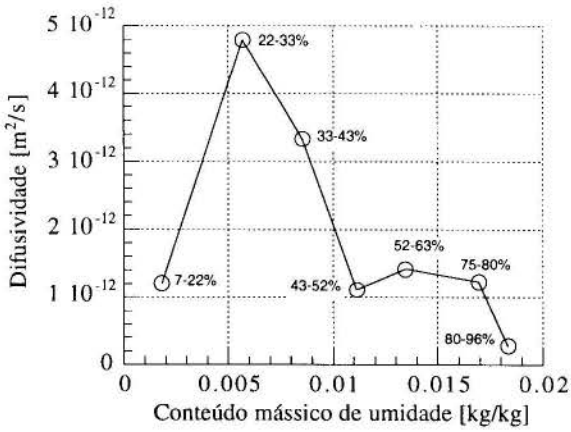


Figura 9. Difusividade isotérmica de umidade da telha de cerâmica na região de vapor

onde D_h representa a difusividade isotérmica [m²/s], j é o fluxo de massa [kg/m² s], Δx representa a espessura da amostra [m], Δw é a diferença de conteúdo mássico de umidade entre as faces da amostra [kg/kg] e DR_{seca} é a densidade relativa do material seco.

A figura 9 apresenta a difusividade calculada a partir do ensaio de adsorção e do ensaio de permeabilidade ao vapor.

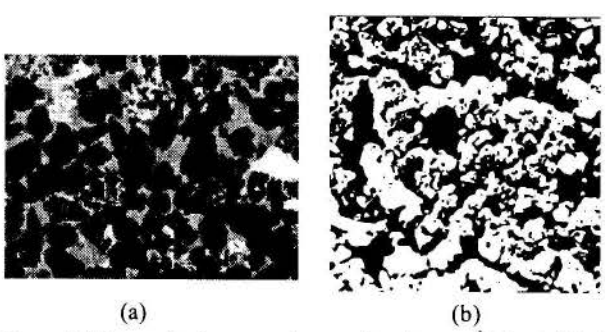
A determinação da difusividade é extremamente complexa, pois tanto o ensaio de adsorção como o de permeabilidade são longos e delicados.

TRABALHOS FUTUROS : ANÁLISE DE IMAGEM

Visando eliminar os experimentos do tipo longo e desgastante, novas alternativas estão sendo estudadas com o objetivo de caracterizar as propriedades de materiais porosos entre os quais se encontra a cerâmica vermelha. Uma das técnicas que têm se mostrado promissoras é a aplicação da análise de imagem sobre micrografias obtidas ao microscópio eletrônico de varredura, Moscheto (1991), Pieritz (1994), Fernandes (1994), Magnani (1996). A caracterização da estrutura porosa permitirá a reconstituição do meio e a simulação dos processos de transporte e retenção de fluidos e calor, e a obtenção das propriedades macroscópicas de transporte de umidade, tais como a difusividade hídrica e a permeabilidade.

A título de exemplo, a figura 10(a) mostra a aplicação da técnica a uma micrografia de arenito berea, e a figura 10(b) uma imagem binarizada de uma argamassa.

Dando início a essa nova fase, partiu-se para a obtenção de micrografias das telhas cerâmicas. A obtenção de micro-



(a) (b)

Figura 10. Exemplo de uma micrografia e imagem binarizada de um materiais porosos (arenito berea e argamassa).

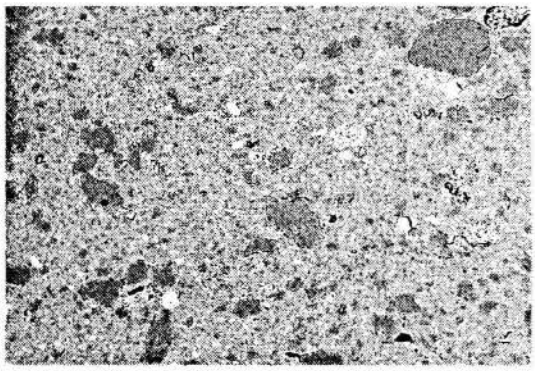


Figura 11. Micrografia em microscópio eletrônico de varredura de uma telha cerâmica (aumento 62 X).

Figura 12. Micrografia de uma telha cerâmica (aumento 7808 X).

grafias de materiais cerâmicos exige um tratamento diferenciado, em função de sua fragilidade e do alto grau de impurezas encontradas neste material. A figura 11 apresenta uma primeira micrografia da telha cerâmica, obtida com ampliação de 62X, num microscópio eletrônico de varredura, operando com elétrons retrodifundidos (back scattering electrons). Pode-se observar a presença de objetos brancos, cinza e de uma massa envolvendo estes objetos. Observa-se ainda a presença de alguns macroporos.

A figura 12 apresenta uma micrografia da mesma amostra, agora com ampliação de 7808 vezes, observe que a imagem não é aproveitável de imediato para a análise de imagem por não apresentar um bom contraste. Em função dos problemas encontrados na obtenção das micrografias, novas técnicas de polimento e preparação das amostras tem sido desenvolvidas.

CONCLUSÕES

Para a telha de cerâmica, foram encontrados os seguintes resultados: A densidade 1880 +/- 80 [kg/m^3] e a porosidade 0.331+/- 0.014 [m^3/m^3] estão de acordo com os valores encontrados na literatura (Ioshimoto e Thomaz, 1992), o conteúdo mássico na saturação foi de w_{sat}= 0.176 +/- 0.001 [kg/kg].

Estes resultados foram confirmados pelo ensaio de porosimetria a mercúrio, onde se encontrou uma densidade de 1830 [kg/m3], uma porosidade de 0.311 [m^3/m^3] e o conteúdo mássico de w_{sat}=0.1702 kg/kg.

O ensaio de adsorção realizado caracteriza a telha de cerâmica como material higroscópico e mostra que o conteúdo de umidade cresce rapidamente para umidades relativas acima de 80%.

O ensaio de permeabilidade foi extremamente lento, demorou um total de 340 dias. A difusividade calculada a partir do ensaio de permeabilidade ao vapor e do ensaio de adsorção, apresenta valores compatíveis com aqueles encontrados na literatura.

REFERÊNCIAS

Brakel, V. J., Modry, S., Svata, M., 1982, "Mercury Porosimetry: State of the Art".

Bueno, A. D., 1994, "Transferência de Calor e Umidade em Telhas: Simulação e Experimentação". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFSC, Florianópolis.

Bueno, A.D., 1996, Lamberts, R., Cunha Neto J.A.B., "Determinação da Temperatura e do Conteúdo Mássico de Umidade de Telhas Expostas ao Meio Ambiente", submetido ao *6° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Tér-micas.*

Bueno, A. D., Philippi, P.C., Lamberts, R., 1992, "Influence of Water Vapour Sorption on the Thermal Behavior of Mortar Samples". *Proceedings of the Third Internacional Masonry Conference*, p. 52-54, London, outubro.

Bueno, A.D., Philippi, P.C., 1996, "Simulações da Transferência de Calor e Umidade em Telhas Expostas ao Meio Ambiente", submetido ao *6° Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas.*

Cunha Neto, J. A. B., 1992, "Transport d'humidité en matériau poreux en présence d'un gradient de température. Caractérisation expérimentale d'un béton cellulaire", *Thèse de Doctorat*, Université Joseph Fourier, Grenoble.

Cunningham, M.J., 1993, "Moisture Transfer in Roof Sections Under Cyclic Condictions and Constant Air Pressure Difference- Laboratory and Modeling Studies". *Building and Enviromental*, V28.

De Vries, D.A., 1958, "Simultaneous Transfer of Heat and Moisture in Porous Media". *Transaction American Geophysical Union.* v. 39, No.8, p.909-916.

De Vries, D. A., 1987, "The theory of heat and moisture transfer in porous media revisited". *I. J. Heat Mass Tranfer.* p.1343-.350.

Everet, D.H,. Haynes, J.M., 1972, "Model Studies of Capillary Condensation I. Cylindrical Pore Model with Zero Contact Angle". *Journal Of Coloidal and Interface Science.* Vol 38, No 1, January .

Fernandes, C. P., 1990, "Estudo dos Processos de Condensação e Migração de Umidade em Meios Porosos Consolidados. Análise Experimental de uma Argamassa de Cal e Cimento". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.

Fernandes C.P., 1994, "Caracterização Morfotopológica de Espaços Porosos: Reconstituição Multiescala e Simulação de Processos de Invasão de Fluídos não Molhantes". *Tese de Doutoramento* defendida no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Ioshimoto, E., Thomaz, E., 1992, "Apostila PCC-334-Técnicas e Materiais de Construção Civil. Materiais cerâmicos para a construção civil". IPT.

Lamberts, R., 1983, "Desempenho Térmico de Coberturas leves com Ático: Bancada de Testes e modelo Matemático". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFGRS, Porto Alegre.

Lamberts, R., 1991, "Desempenho térmico do produto cerâmico: a questão da normalização", Anais do *III Simpósio de desempenho de Materiais e Componentes de Construção Civil*, Florianópolis, p.135-138.

Magnani F.S., 1996, "Determinação das Configurações de Equilíbrio em Meios Porosos Indeformáveis". *Tese de Doutora-mento* defendida no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Merouani, L., 1987, "Phénomenes de sorption et de transfert d'humidité dans des matériaux du bâtiment. Étude expérimentale comparative d'un mortier de ciment et d'un enduit de façade." *These Docteur 3° Cycle*. Institut National Polytechnique de Grenoble.

Moscheto, C., 1991, "Caractérisation de la Structure Poreuse des Matériaux par Analyse D'Images: Apport des Distances Discrètes à la Morphologie Mathématique. *Rapport de Stage*. Grenoble, 49p.

Philip, J.R., De Vries D.A., 1957, "Moisture movement in porous materials under temperatura gradients", *Transation of the American Geophysical Union*. v.38, n.2, p.222-232.

Philippi, P.C., Fernandes C.P., Yunes, P.R, 1993, "Higroscopicidade e Capilaridade nos Materiais de Construção". *Anais 2° Encontro Nacional de Conforto no Ambiente Construído*. pp.171-178. Florianópolis.

Pieritz R.A., 1994, "Desenvolvimento das Técnicas do Gráfico da Linha Mediana e da Binarização por Regiões Conexas Aplicadas à Caracterização Geométrica de Meios Porosos". *Dissertação de mestrado* defendida no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Souza H.A., 1993, "Estudo dos Processos de Fixação e Transferência Isotérmica de Umidade em Meios Porosos Heterogêneos". *Tese de Doutoramento* defendida no Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Yunes, P., 1992, "Determinação da Distribuição de Poros de uma Argamassa de Cimento e Cal Usando as Isotermas de Equilíbrio e Dados de Microscopia Eletrônica". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.

ABSTRACT

This work describes the determination of higro-thermal properties of clay tile, from experimental results of density, porosity, humidity content in saturation, adsorption, mercury porosimetry and vapor permeability. It is also presented the determination of vapor difusivity, and future work is proposed, using eletrônic microscopy combined with image análise, to identify transport properties from numerical simulation.

DETERMINAÇÃO DA TEMPERATURA E DO CONTEÚDO MÁSSICO DE UMIDADE DE TELHAS EXPOSTAS AO MEIO AMBIENTE

Bueno A. D[1], Lamberts R[1], Da Cunha Neto J.A.B[2]
(1) Núcleo de Pesquisa em Construção ,
(2) Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas dos Materiais .
Universidade Federal de Santa Catarina - 88 040-900 - Florianópolis - SC -Brasil

RESUMO

Apresentam-se os resultados de um ensaio de campo, em que se determina a evolução da temperatura e do conteúdo mássico de umidade de um grupo de telhas de diferentes materiais. Numa primeira medição, é avaliado o efeito das trocas de umidade sobre a evolução da temperatura das telhas; compara-se as temperaturas de telhas permeáveis e impermeáveis, e analisa-se ainda a influência de sua cor. Outras medições revelam o efeito das chuvas na evolução da temperatura das telhas.

INTRODUÇÃO

Muitos estudos têem sido desenvolvidos, com o objetivo de reduzir a carga térmica das edificações e melhorar o conforto térmico do usuário (Lamberts, 1983; Bueno et alli, 1992, Cunningham 1993; Bueno, 1994). Este trabalho procura caracterizar as propriedades do material cerâmico (telha); com os objetivos:

- Comparar o desempenho higro-térmico das telhas permeáveis versus impermeáveis, quando só ocorrem trocas de massa.
- Verificar a influência da cor das telhas em seu comportamento higro-térmico.
- Comparar a telha de cerâmica (padrão) com os outros tipos de materiais.

A avaliação do comportamento higro-térmico da telha em ensaios de campo, associados à determinação de propriedades higro-térmicas da telha e à realização de simulações numéricas, permitirá o desenvolvimento de nova telha de cerâmica com melhores propriedades.

METODOLOGIA

O ensaio de campo consiste na determinação da temperatura e da massa de um grupo de telhas expostas ao meio ambiente. A *Tabela 1* mostra a codificação das diferentes telhas utilizadas neste ensaio.

Instrumentação: Para a determinação da temperatura, são utilizados termopares do tipo T (cobre-constantan). Os termopares foram fixados no centro das telhas, numa profundidade de 8 mm, com cola do tipo cascorez e pó da própria telha. Os termopares forão conectados através de cabos blindados ao sistema de aquisição HP Data Aquisition 3852S. A incerteza prevista na determinação das temperaturas é de 0.5°C. As telhas ficaram apoiadas numa bancada voltada para o norte, com uma inclinação de 5%, a fim de evitar o acúmulo de água nas telhas, devido a suas saliências. Não existia qualquer proteção às telhas; as mesmas foram simplesmente apoiadas sobre um ripamento de madeira. A massa das telhas é determinada utilizando-se uma balança com resolução 0.05g, mas a incerteza na medição é maior, devido à influência do vento. As amostras foram impermeabilizadas com impermeabilizante comercial.

A figura 1 mostra a bancada experimental, e as figuras 2 e 3 apresentam as telhas utilizadas no ensaio. A telha cerâmica colonial do tipo plan, será chamada simplesmente de plan.

Tabela 1: Amostras do ensaio de campo

Tipo de telha	Cor com que foi pintada	Permeável/ Impermeável	Código nas figuras
Plan	Natural(verm.)	Permeável	P1 e P2
Plan	Branca (cal)	Permeável	PBP
Plan	Preta (cal+pó xadrez)	Permeável	PPP
Plan	Natural (verm)	Impermeável	PNI
Plan	Branca (cal)	Impermeável	PBI
Plan	Preta (cal+pó-xadrez)	Impermeável	PPI
Francesa	Natural(verm)	Permeável	FNP
Termoplan	Natural(verm)	Permeável	TNP
Argamassa	Natural (cinza)	Permeável	ARGNFP
Argamassa	Branca (cal)	Permeável	ARGBP
Argamassa	Natural (cinza)	Permeável	ARGNP
Cim.Amianto	Branca (cal)	Impermeável	AMB
Cim.Amianto	Natural	Impermeável	AMN

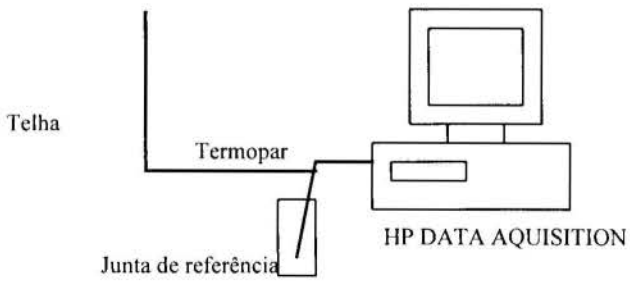


Figura 1 : Esboço da montagem do ensaio de campo.

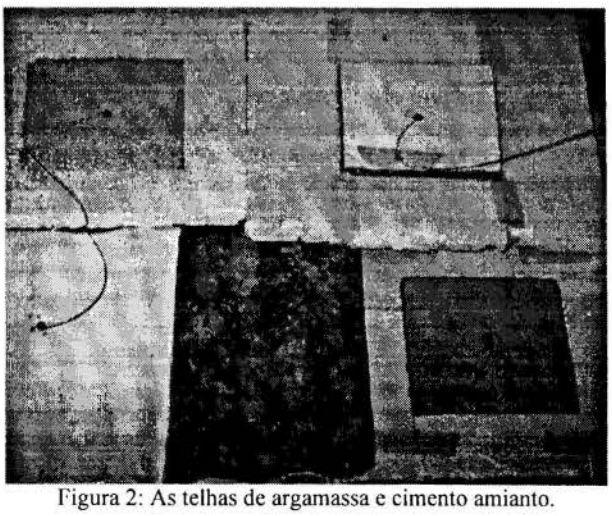


Figura 2: As telhas de argamassa e cimento amianto.

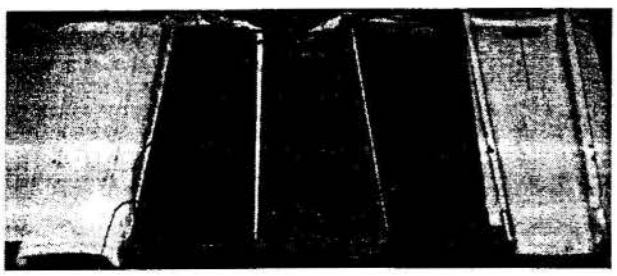


Figura 3: As telhas de cerâmica do tipo plan.

As medições foram realizadas no período de 1 a 15 de setembro de 1993. A aquisição de dados era realizada automaticamente pelo HP DATA AQUISITION, conectado a um microcomputador, numa frequência de 10 leituras a cada 3 minutos por telha (registra-se a média das 10 leituras).

Dados climáticos para a medição 1. A medição 1 iniciou dia 04/09/93 às 15h e terminou dia 05/09/93 às 19 h.

Os dados climáticos foram obtidos junto ao LABSOLAR (Laboratório Solar-EMC-UFSC), que forneceu os dados com um intervalo de medição de 2 minutos. A *Figura 4* apresenta os dados de radiação global, radiação em onda longa, e temperatura do ar para o intervalo da medição 1. Pode-se observar que entre 20h e 23h ocorreu um aumento da temperatura do ar e da energia radiante emitida do céu para a telha.

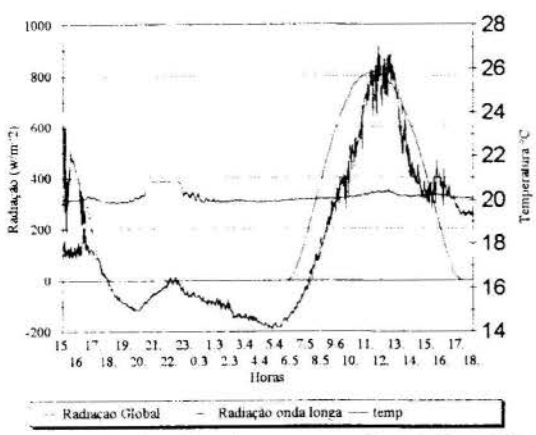


Figura 4: Dados climáticos, para medição 1 [LABSOLAR]

RESULTADOS

Na medição 1, objetiva-se avaliar a evolução da temperatura e do conteúdo mássico de umidade nas diferentes telhas.

O conteúdo mássico de umidade, é a relação entre a massa de líquido incorporada pela amostra, pela massa seca da amostra.

A *Figura 5* apresenta os valores de conteúdo mássico de umidade, para todas as telhas permeáveis; e a *Tabela 2*, os valores de variação do conteúdo mássico de umidade. A principal observação é o maior ganho de umidade pela telha plan permeável, denominada de padrão 1 (P1), que teve uma variação do conteúdo de umidade de $\Delta w=0.0087$ contra uma variação de $\Delta w=0.0051$ da telha P2. O ganho de umidade corresponde a uma variação em massa de 17g para P1 e de 10g para P2. Considera-se que esta diferença ocorre em função das telhas P1 e P2 terem provavelmente um estrutura porosa diferente, a telha P1 absorve umidade mais facilmente que P2 por ter maior quantidade de poros menores. Simulações numéricas desenvolvidas por Bueno (1994) indicam que uma telha de argamassa com porosidade e densidade semelhantes às da telha de cerâmica podem ter uma variação do conteúdo de $\Delta w=0.09$ somente com as trocas de umidade com a atmosfera.

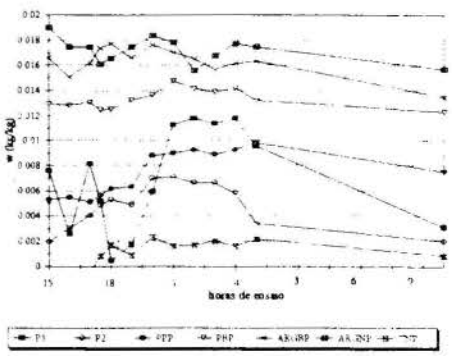


Figura 5: Conteúdo mássico de umidade para a medição 1

Tabela 2:Variação do conteúdo mássico de umidade

Amostra	Δw
P1	0.0087
P2	0.0051
PBP	0.0024
PPP	0.0022
TNP	0.0015
ARGBP	0.0041
ARGNP	0.0027

A *Figura 6* apresenta a evolução das temperaturas para todas as telhas. Esta figura é apresentada para que se possa comparar o desempenho térmico das diferentes telhas ensaiadas.

A primeira observação é a existência de três níveis de temperatura, bem definidos; as temperaturas mais altas são atingidas pelas telhas pretas, o segundo nível para as telhas de cor natural, e o terceiro patamar para telhas brancas. Ou seja a cor é fator essencial no desempenho térmico das telhas, sendo aconselhável as cores claras para climas quentes.

A telha de maior interesse para este trabalho é a telha de cerâmica permeável, designada de padrão 1 (P1). Para que se possa obter maiores informações deste ensaio, apresenta-se a seguir a temperatura das telhas em grupos e compara-se a temperatura das mesmas com a padrão 1.

Confeccionou-se no Laboratório de Construção Civil, do Departamento de Engenharia Civil, três amostras de argamassa, com as dimensões 10X10cm de largura, duas com 3cm de espessura (ARGBP, ARGNP) e uma com 1.5cm de espessura (ARGNFP). A *Figura 7*, apresenta as diferenças de temperatura das telhas de argamassa em relação à telha P1. Observa-se que todas apresentam temperaturas noturnas menores que P1 e diurnas maiores. A amostra fina ARGNFP chega a atingir 2°C abaixo de P1 às 3h da manhã, e 8°C acima de P1 às 12h do segundo dia.

No início do ensaio ARGBP apresenta a menor temperatura, já às 18h está com a temperatura maior que a ARGNFP e ARGNP. A temperatura de ARGNP é menor que a ARGNFP, o que evidencia o efeito da capacidade térmica.

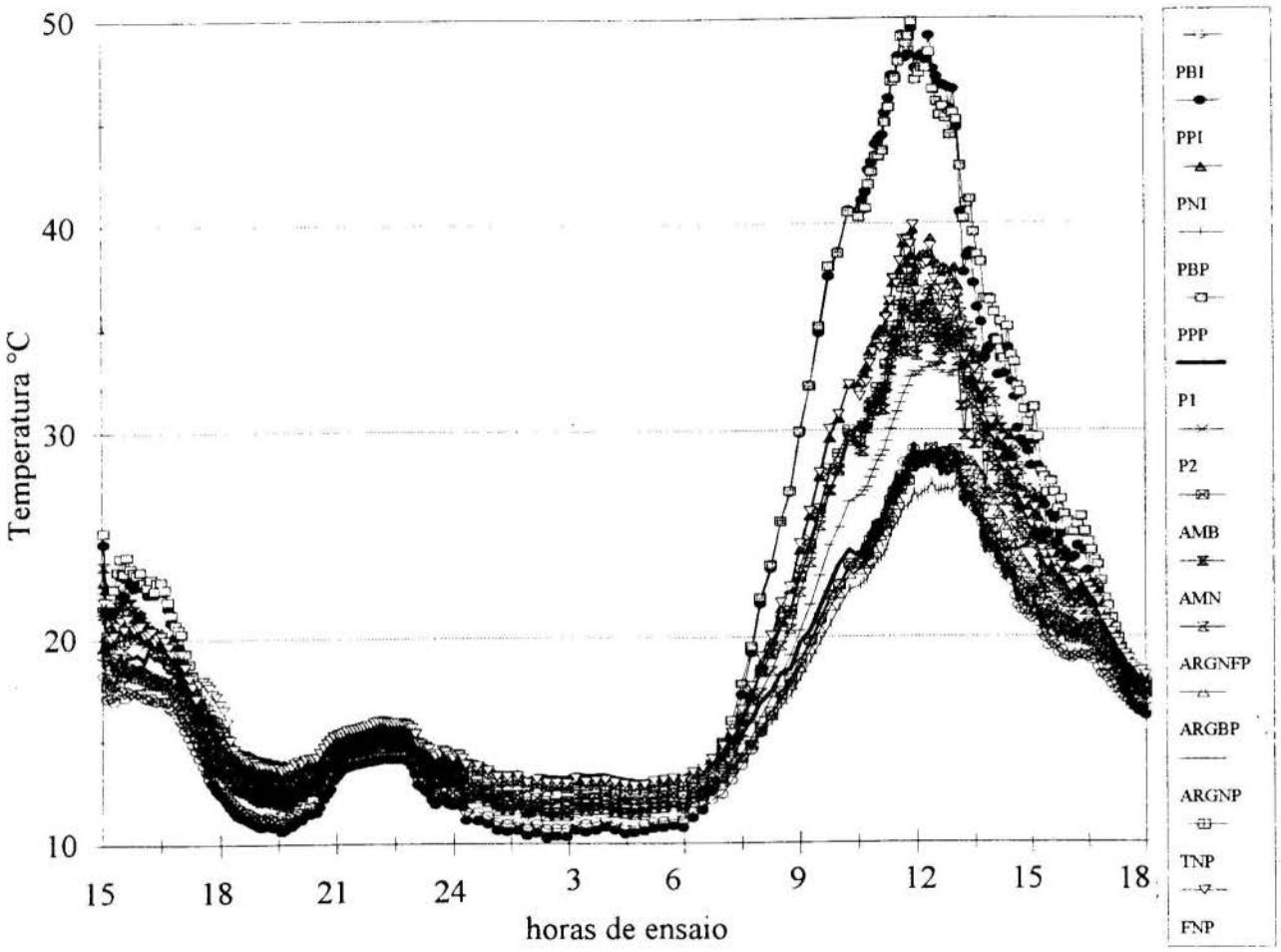


Figura 6: Temperatura de todas as telhas para a medição 1.

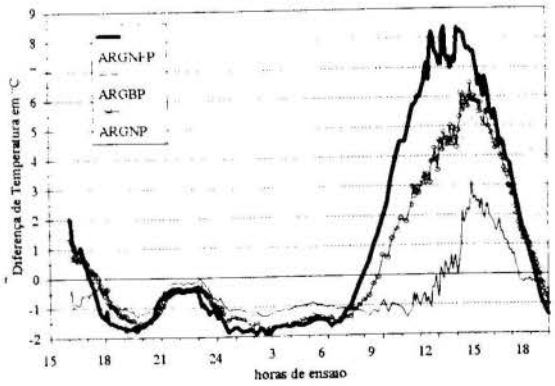


Figura 7: Diferença de temperatura para telhas de argamassa em relação a P1.

Telha Padrão 1 versus telha de cimento amianto. A *Figura 8* apresenta as diferenças de temperatura das telhas de cimento amianto em relação à telha padrão 1. Observa-se que as mesmas têm temperaturas noturnas menores e diurnas maiores que P1. A AMB apresentou temperaturas diurnas maiores que P1 entre 12h e 16h do segundo dia. Verifica-se que a temperatura da AMB é menor que a AMN ao longo de toda a medição, com excessão do trecho entre 21h e 23h em que ocorreu o fechamento da janela atmosférica (Todos os corpos horizontais perdem energia por radiação para o espaço, esta perda de energia ocorre em função da baixa absorção que o vapor d'agua oferece para radiação em determinado comprimento de onda (ondas longas). Parte da radiação em ondas longas emitida pelos materiais não é absorvida pelo céu. Esta perda de energia é proporcional à nebulosidade; se não existem nuvens a perda de energia é maior e diz-se que a janela atmosférica está aberta, caso contrário diz-se que a janela atmosférica está fechada.). Com o fechamento da janela atmosférica entre 21h e 23h, predominam os efeitos convectivos e a temperatura das telhas se aproxima da temperatura do ar.

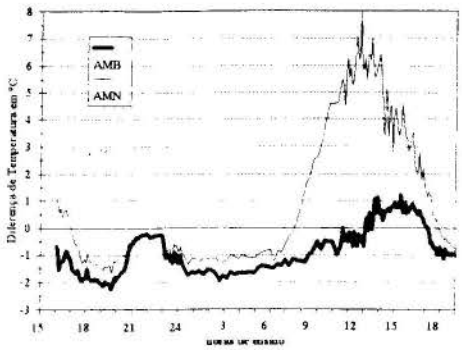


Figura 8: Diferença de temperatura para telhas de cimento amianto em relação a P1.

Telha Padrão 1 versus telha francesa e termoplan. A telha termoplan é extrudada enquanto as demais são prensadas. A mesma tem dutos de ventilação, o que ocasiona uma menor variação do conteúdo de umidade, e uma influência muito grande dos efeitos convectivos.

A *Figura 9* apresenta as diferenças de temperatura da telha termoplan e francesa em relação a P1. A telha termoplan apresenta temperatura abaixo da telha francesa em cerca de 0.3°C no período noturno e 1.2°C entre 10h e 12h do segundo dia. As temperaturas da telha termoplan estão muito próximas às da telha francesa, e acima da padrão 1. Isto indica que está telha não apresenta melhor desempenho térmico, nas condições em que os ensaios foram realizados.

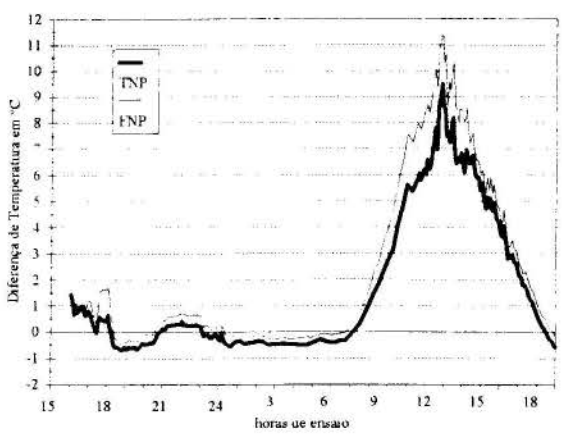


Figura 9: Diferença de temperatura para telhas francesa e termoplan em relação a P1.

Telha Padrão 1 versus Padrão 2. A *Figura 10* apresenta a comparação das temperaturas entre P1 e P2. As temperaturas das duas telhas são ligeiramente diferentes no período noturno, isto ocorre porque a telha padrão 1 absorveu 17g de água contra 10g da padrão 2, ficando com temperatura ligeiramente superior no período noturno.

Estas diferenças de temperatura, ocorrem possivelmente, pelo fato de as duas telhas terem estruturas porosas diferentes. Ressalta-se que as duas telhas, estavam posicionadas lado a lado. Resulta disso que com a alteração das propriedades higrotérmicas das telhas cerâmicas (densidade, porosidade, distribuição de poros), pode-se desenvolver uma telha cerâmica com melhor desempenho térmico.

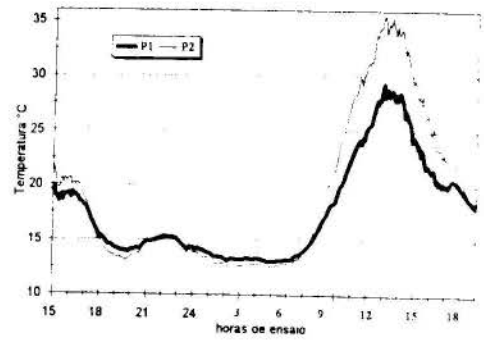


Figura 10: Evolução da temperatura para telha padrão 1 versus padrão 2.

Efeito da cor. A *Figura 11* apresenta as diferenças de temperatura atingidas pelas telhas tipo plan na cor preta em relação a P1. A PPP apresenta temperatura noturna maior que a PPI, mas as temperaturas diurnas são praticamente as mesmas. Isto evidencia, primeiro, que o efeito da radiação é o elemento que exerce maior influência nestas telhas. Segundo, o ganho de desempenho térmico em função da permeabilidade é menor nas telhas pretas.

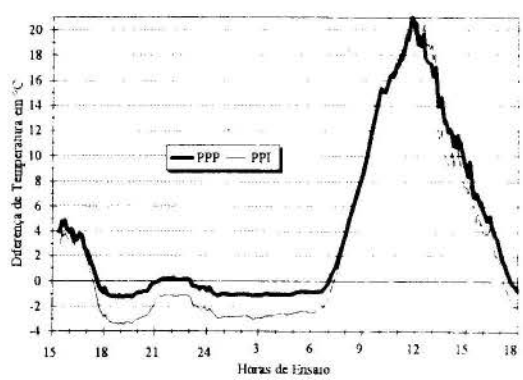


Figura 11: Diferença de temperatura da telha plan preta permeável e impermeável em relação a padrão P1.

A *Figura* 12 apresenta a evolução da temperatura da telha plan vermelha permeável e impermeável. No início do ensaio, a temperatura da telha permeável é maior, mas como ocorre absorção de umidade a sua temperatura sobe, superando a na telha impermeável. Durante o dia, com a incidência da radiação solar, a temperatura das telhas sobe. Ocorre aumento da concentração de vapor da telha permeável e a mesma passa a perder umidade, como no processo de mudança de fase ocorre troca de energia por calor latente, a temperatura da telha permeável fica menor que a da telha impermeável.

Verifica-se que a temperatura da telha impermeabilizada é maior ao longo de todo o período diurno, atingindo os 38 °C, já a telha permeável atinge 28 °C. A partir das 17h do segundo dia, a temperatura da telha permeável fica acima da impermeável devido novamente à absorção da umidade.

A *Figura 13* apresenta a diferença entre as temperaturas das telhas brancas permeável e impermeável em relação a P1. As duas telhas brancas têm temperaturas menores que P1 ao longo de todo o dia, com exceção do trecho entre 15h e 16h do segundo dia. Observe que a telha plan branca permeável, tem temperatura noturna maior que a plan branca impermeável, e temperatura diurna menor.

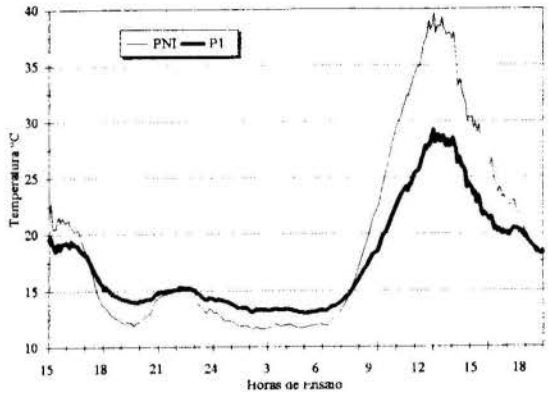


Figura 12: Evolução da temperatura para telhas vermelhas permeável e impermeável.

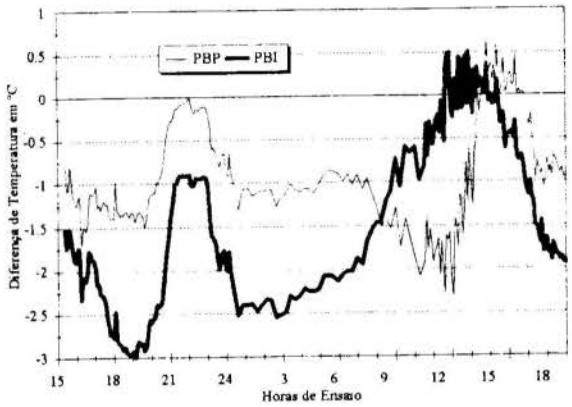


Figura 13: Diferença da temperatura da telha plan branca permeável e impermeável em relação a padrão P1.

A medição 1 apresentou os efeitos das trocas de umidade na evolução da temperatura das telhas permeáveis e impermeáveis. Destaca-se que o ensaio foi realizado num dia atípico, em que ocorreu uma redução da emissão de radiação em ondas longas para o céu, diminuindo o ganho de umidade pelas telhas permeáveis. Em um dia típico os ganhos de umidade deverão ser maiores, e as telhas permeáveis terão menores temperatura diurnas, principalmente em um dia de verão em que a radiação é maior e a nebulosidade menor (normais climatológicas,1990).

Medição 2: Efeitos da Chuva A medição 2 apresenta o efeito das chuvas sobre o comportamento térmico das telhas permeáveis, iniciou dia 07/09/93 às 17 horas e terminou dia 08/09/93 às 15 horas.

A *Figura 14*, mostra a evolução dos conteúdos mássicos de umidade. Às 23h e 45m ocorreu a primeira chuva, com duração de, 5m, ocasionou um aumento do conteúdo mássico de umidade de w=0 para w=0.06 (em média); a temperatura das telhas caiu cerca de 1°C . Entre 23h e 45min do primeiro dia e 3h do segundo dia, não voltou a chover e o conteúdo mássico de umidade nas telhas caiu para w≈0.05. Às 5h da manhã voltou a chover, agora com mais intensidade, a redução na temperatura das telhas sofreu um pico de ≈7°C, que se estabilizou em 2°C. O conteúdo de massa passou para w≈0.1. Após as 5h continuou uma chuva fina até às 7h, o que ocasionou a manutenção do conteúdo de umidade em w=0.1. Às 9h da manhã voltou a chover, uma chuva fraca mas que durou o resto do dia. Às 13h do segundo dia as telhas se saturaram, o que pode ser verificado por inspeção.

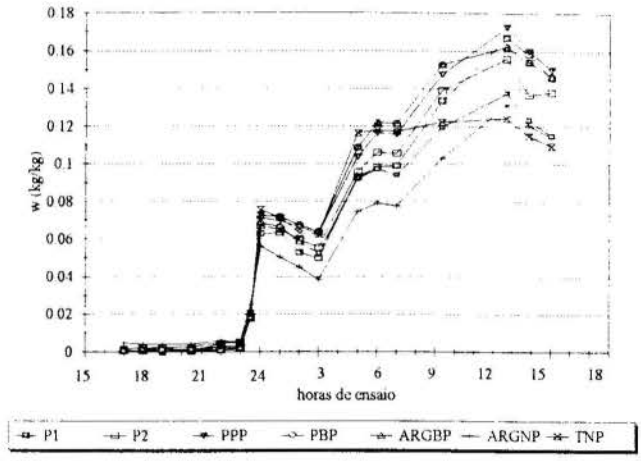


Figura 14: Conteúdo mássico de umidade para a medição 2.

A *Figura* 15, mostra a evolução da temperatura para a medição 2. Observe que às 5h da manhã, com a segunda chuva forte, as telhas tiveram uma brusca redução de sua temperatura (cerca de 7°C), a temperatura das telhas ficou mais próxima da temperatura da chuva; logo depois, as temperaturas subiram cerca de 5°C, devido aos efeitos convectivos, de forma que a redução efetiva da temperatura na segunda chuva foi de cerca de 2°C.

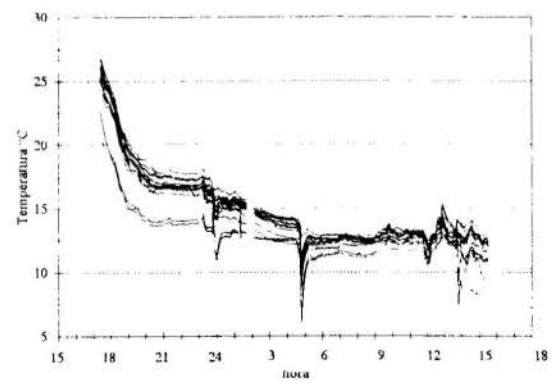


Figura 15: Evolução da temperatura para a medição 2.

Medição 3 e 4: Efeito da secagem das telhas e da nebulosidade. Ao fim do segundo ensaio as telhas estavam saturadas, e ao longo do terceiro ensaio foram se secando. O tempo total de evaporação das águas da chuva foi de 32h. Observe que durante todo este intervalo de tempo a temperatura das telhas permeáveis é menor que da telha impermeável, mesmo no período noturno. O mesmo resultado foi encontrado por Bueno (1994), através de simulações numéricas.

Apresenta-se abaixo a *figura* 16, onde temos os resultado da medição 4. Na medição 4 pode ser observado o efeito da

nebulosidade na temperatura das telhas. Observe a grande variação das temperaturas, com ascensões e quedas bruscas, que corresponde à passagens de nuvens.

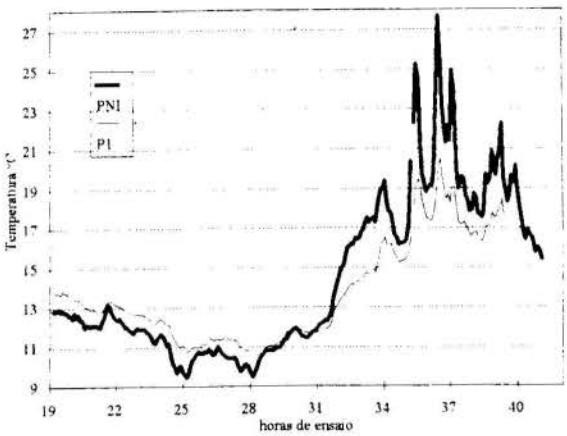


Figura 16:Evolução da temperatura para a medição 4.

CONCLUSÃO

Através do ensaio de campo, pode-se concluir que as telhas permeáveis absorvem umidade no período noturno devido a dois processos principais:

- Primeiro, a perda de calor por radiação em onda longa através da janela atmosférica, que faz com que a temperatura superficial da telha fique abaixo da temperatura de orvalho, e neste processo a telha ganhe umidade do ar.
- Segundo, no período diurno, a incidência da radiação solar eleva a temperatura da telha para valores acima da temperatura do ar, elevando a concentração de vapor na superfície da telha para valores acima da concentração de vapor no ar, de forma que a telha perde umidade. Esta perda de umidade devido a radiação solar, vai ser recuperada, após o por do sol. Ou seja ocorre absorção da umidade que foi perdida devido a radiação solar. Observa-se então que mesmo em dias nublados (em que não ocorrem perdas de calor por radiação em ondas longas, para a janela atmosférica) ocorre variação do conteúdo de umidade da telha em função unicamente da radiação solar.

O fato observado para as telhas permeáveis, de terem maior temperatura noturna e menor temperatura diurna em relação às telhas impermeáveis, ou seja, menor amplitude térmica, foi confirmado para todos os tipos de telhas nas diferentes cores.

Para a segunda medição, destaca-se a importância das chuvas; A telha pode se saturar, sem que ocorra elevação da temperatura, pois não ocorre mudança de fase e durante todo o intervalo de tempo necessário para que a massa de líquido incorporada pela chuva seja evaporada, a temperatura da telha permeável é menor que a temperatura da telha impermeável.

Com as medições 3 e 4 pode-se observar a grande influência da nebulosidade nos picos de temperatura das telhas.

Extrapolando estes resultados para um período de verão, em que a radiação solar é maior, e as noites são menos nubladas
(normais climatologicas, 1990), as trocas de umidade serão maiores tanto pela maior radiação solar, como em função das maiores perdas de energia por radiação em ondas longas.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Sérgio Colle [LABSOLAR] por ter permitido a utilização de bancada para a realização desta experiência e fornecido os dados climáticos. Ao bolsista Ricardo Veríssimo por ter auxiliado na montagem dos termopares e feito o programa de aquisição de dados.

REFERÊNCIAS

Bueno, A. D., Philippi, P.C., Lamberts, R., 1992, "Influence of Water Vapour Sorption on the Thermal Behavior of Mortar Samples". *Proceedings of the Third Internacional Masonry Conference*, p. 52-54, London, October.

Bueno, A. D. 1994, "Transferência de Calor e Umidade em Telhas: Simulação e Experimentação". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFSC, Florianópolis.

Cunningham, M.J., 1993, "Moisture Transfer in Roof Sections Under Cyclic Condictions and Constant Air Pressure Difference- Laboratory and Modeling Studies". *Building and Enviromental*, V28.

Fernandes, C. P., 1990, "Estudo dos Processos de Condensação e Migração de Umidade em Meios Porosos Consolidados. Análise Experimental de uma Argamassa de Cal e Cimento". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.

Lamberts, R., 1983, "Desempenho Térmico de Coberturas leves com Ático: Bancada de Testes e modelo Matemático". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, UFGRS, Porto Alegre.

Normais Climatológicas. Dados para Florianópolis, período de 1960-1990.

Philipppi, P.C., Fernandes C.P., Yunes, P.R, 1993, "Higroscopicidade e Capilaridade nos Materiais de Construção". *Anais 2 Encontro Nacional de Conforto no Ambiente Construído*. pp.171-178. Florianópolis.

Yunes, P., 1993, "Determinação da Distribuição de Poros de uma Argamassa de Cimento e Cal Usando as Isotermas de Equilíbrio e Dados de Microscopia Eletrônica". *Dissertação de Mestrado*, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Florianópolis.

ABSTRACT

This work describes heat and mass transfer trough a porous tile exposed to environment. It compares permeable and impermeable tiles. The results indicate the influence of vapor sorption in temperature evolution of permeable tile.

In a first experiment, the effect of humidity in temperature evolution is analised; the temperature evolution of permeable and impermeable samples are compared, and the effect of colors is evaluated. Others experiments show the effect of rain on thermal performance of clay tiles.

ABCM

UM MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE FLUXO RADIANTE ATRAVÉS DE PERSIANAS HORIZONTAIS EXTERNAS ESPELHADAS

Fernando Oscar Ruttkay Pereira, PhD
Laboratório de Conforto Ambiental - ARQ - CTC
Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC
88.040-900 - Florianopolis/SC - BRASIL

RESUMO

Este artigo apresenta um modelo para simulação do comportamento radiante de um sistema de sombreamento de aberturas que incorpora superfícies de reflexão especular. O modelo proposto é baseado numa formulação bastante conveniente do método da radiosidade, permitindo a consideração de superfícies tanto especulares como difusas. Resultados obtidos pela formulação proposta são comparados com dados experimentais obtidos com o uso de um equipamento que mede o fluxo de energia radiante através de aberturas em modelo reduzido. As diferenças relativas médias (DRM) entre valores teóricos e experimentais ficaram na ordem de 2 a 3 %. 4 destes últimos.

INTRODUÇÃO

Sistemas de aberturas têm sido propostos no sentido de captar e redirecionar a luz solar como fonte de luz natural, sem contribuir excessivamente na carga térmica. Persianas espelhadas são um dos exemplos mais comuns de sistemas de reflexão especular. As superfícies devem ser ajustadas regularmente para manter sua capacidade de sombreamento e manter a iluminação a uma profundidade constante no espaço. Portanto, é necessário não somente definir claramente a relação geométrica a ser mantida entre o sol, o sistema de persianas e o ambiente, como também o comportamento radiante (admissão de calor e luz) do sistema de abertura.

Um sistema de persianas horizontais parcialmente aberto, transmite, absorve e reflete a radiação incidente. Esta ação ocorre da seguinte forma: uma parte da radiação é transmitida diretamente através das lâminas (1), e a outra parte atinge a superfície da lâmina; radiação que incide na lâmina é parcialmente absorvida e refletida. A seguir, parte da porção refletida segue para dentro do ambiente (2), parte volta para o ambiente externo (3) e o resto segue seu caminho atingindo a lâmina adjacente (4); novamente é parcialmente absorvida e refletida (para dentro (5) e para fora (6)) (ver Fig. 1).

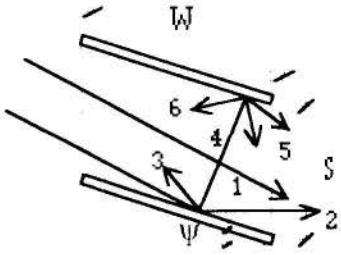


Figura 1 - Trajetórias da radiação através de um sistema de persianas.

A magnitude e distribuição da radiação que é transmitida, absorvida e refletida (para dentro e para fora) depende de:

(i) *Fonte da radiação* - o sol é a fonte primária de radiação com a abóbada celeste e os elementos do entorno constituindo-se em fontes secundárias. Por causa de suas características direcionais é necessário que sejam consideradas separadamente;

(ii) *Geometria da persiana* - largura das lâminas (W), espaçamento (S) e ângulo de inclinação (ψ) são variáveis independentes significativas;

(iii) *Absortividade e refletividade das lâminas* - não apenas as proporções da radiação que é absorvida e refletida são importantes, mas também a distribuição angular da radiação emergente.

Para a determinação das condições térmicas e distribuição de luz finais no espaço interno é necessária uma definição precisa tanto da geometria do sistema (Pereira, 1995) como das proporções resultantes da radiação incidente sobre o sistema de persianas.

A revisão bibliográfica sobre o comportamento radiante de sistemas de persianas (IES Handbook, 1995; ASHRAE Handbook, 1993; Moore, 1993) mostra que a evolução dos diversos sistemas propostos está intimamente ligada à evolução dos computadores. Quanto mais poderosos se tornam os computadores, mais complexos são os algoritmos propostos para descrever o comportamento de cada vez mais complexos sistemas de sombreamento e iluminação natural e ambientes.

Embora um sistema de persianas se comporte como um meio de *passagem* para a radiação incidente com respeito ao ambiente interno, a cavidade da persiana é bastante similar a cavidade interna de um quarto. Portanto, a maioria dos sistemas gerais utilizados para descrição do comportamento radiante de ambientes internos podem ser aplicados tanto para sistemas de persianas como quartos numa edificação.

MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE FLUXO

O sistema de persianas considerado apresenta a face de cima das três lâminas superiores, situadas acima do nível de visão, coberta com uma película espelhada. Uma vez que estas superfícies estejam posicionadas corretamente para obter o máximo da luz do sol disponível, elas são responsáveis pela primeira e principal reflexão, especular neste caso. Após esta, todas as outras reflexões entre as lâminas e mesmo no ambiente interno são assumidas como perfeitamente difusas.

Portanto, como os métodos de "ray-tracing" e Monte Carlo não são muito eficientes no tratamento de interação difusa, por causa da infinidade de raios que deveriam ser seguidos, exigindo um grande esforço computacional, o método da radiosidade parece ser a melhor escolha para a situação presente.

O método descrito nesta seção é baseado numa formulação bastante conveniente do método da radiosidade, apresentado por Sparrows et al (1962), que permite a consideração de superfícies tanto especulares como difusas.

Teoria geral da radiosidade. A teoria da radiosidade descreve um equilíbrio de balanço de energia numa envolvente. Energia radiante deixando uma superfície (radiosidade) consiste de duas partes: emissão própria e reflexão da energia incidente.

$$B_i = E_i + \rho_i \sum_{j}^{n} B_j F_{ij} \qquad (1)$$

- *radiosidade* (B): energia total por unidade de área que deixa uma superfície i por unidade de tempo; soma da energia emitida e refletida;
- *emissão* (E): energia total por unidade de área emitida por uma superfície i por unidade de tempo;
- *refletividade* (ρ): fração da energia incidente que é refletida pela superfície i de volta para o ambiente;
- *fator de forma* (F): fração da energia total que deixa uma superfície (i) que chega numa outra superfície (j).

Modelo matemático. Esta seção descreve uma adaptação da formulação do método da radiosidade apresentado por Sparrow et al (1962) para o comportamento radiante de uma persiana refletora. Embora seja prático e conveniente, não existe aqui a pretensão do desenvolvimento de uma formulação completa do fenômeno de transferência de energia radiante através de um sistema de persianas.

Como esta proposta tem o objetivo de modelar tanto o aspecto de transferência da radiação térmica como luminosa, num primeiro momento, por conveniência, todas as superfícies são assumidas não emissoras. Num segundo momento, a energia radiante retransmitida para o interior pelo conjunto vidro-persiana é estimada globalmente.

O modelo é limitado a superfícies planas e envolventes nas quais todas as superfícies participantes refletem de modo perfeitamente difuso. Uma extensão da formulação da teoria da radiosidade é possível pela consideração de aspectos da ótica: espelhos planos refletem energia radiante como se ela fosse proveniente de uma imagem atrás do espelho (ver Figura 2). Este conceito já foi adotado anteriormente na determinação de trocas radiantes por Eckert & Sparrow (1961).

Considerando a configuração da persiana da Figura 2, a superfície 3 é um refletor especular, enquanto a superfície 2 é um refletor difuso. As áreas 1 e 4 são assumidas perfeitamente transparentes e com refletividade zero. O fluxo radiante é introduzido na cavidade da persiana pela área 1, sendo assumido uma parcela difusa e uniforme (componente celeste) e uma parcela colimada (componente do sol).

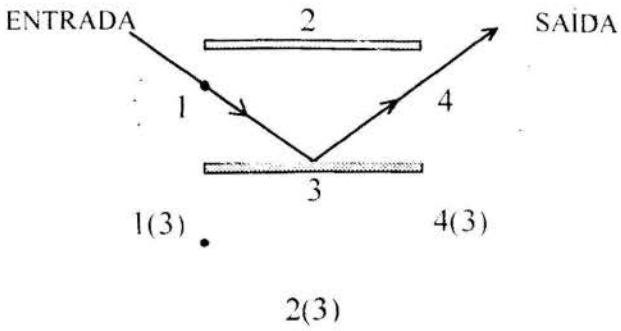


Figura 2: Cavidade da persiana com uma superfície especular.

Assim, para o cálculo da energia que atravessa o plano 4 é necessário a definição do balanço de fluxo radiante para este plano. A energia H_4 que chega no plano 4 vem dos outros planos (1,2 e 3) de acordo com o que segue:

☼ *energia de 1 para 4 diretamente*: energia que deixa uma superfície pode ser entendida como sua radiosidade B.

$$B_1 A_1 F_{14} \qquad (2)$$

onde B_1A_1 é a energia que deixa 1 em todas as direções e F_{14} é a fração que chega no plano 4. Aplicando a lei da reciprocidade, a energia que chega diretamente em 4 vindo de 1 por unidade de tempo e área é

$$B_1 F_{41} \qquad (3)$$

☼ *energia de 1 para 4 através de reflexão em 3*: a imagem do plano 1 refletido no espelho 3 aparece como 1(3) (ver Figura 2). Assim, para o plano 4, a energia refletida parece originar da imagem do plano 1 no espelho 3.

$$[B_1 F_{41(3)}]\, \rho_3 \qquad (4)$$

☼ *energia de 2 para 4 diretamente*:

$$B_2 F_{42} \qquad (5)$$

☼ *energia de 2 para 4 via reflexão em 3*:

$$[B_2 F_{42(3)}]\, \rho_3 \qquad (6)$$

☼ *energia de 3 para 4 diretamente*: considerando que a energia refletida em 3 já foi considerada e que todas as superfícies são assumidas serem não-emissoras, como explicado anteriormente, esta fração é nula.

A partir das expressões acima, a energia que chega no plano 4 pode ser obtida por

$$H_4 = B_2\, [F_{42} + \rho_3 F_{42(3)}] + B_1\, [F_{41} + \rho_3 F_{41(3)}] \qquad (7)$$

A energia refletida especularmente proveniente do espelho 3 foi dividida e incluída na troca radiante direta a partir dos planos 1 e 2.

Desenvolvendo-se balanços similares, obtém-se:

$$H_2 = B_1 [F_{21} + \rho_3 F_{21(3)}] + \rho_2 H_2 [\rho_3 F_{22(3)}] \quad (8)$$

que pode ser escrita como

$$H_2 = \frac{B_1 [F_{21} + \rho_3 F_{21(3)}]}{(1 - \rho_2 [\rho_3 F_{22(3)}])} \quad (9)$$

e

$$H_3 = B_1 [F_{31}] + B_2 [F_{32}] \quad (10)$$

Substituindo B_1 pela emissão difusa de um céu uniforme I_{SV}, as radiosidades B_2 e B_3 podem ser obtidas a partir de duas equações algébricas lineares e simultâneas que podem ser escritas na forma matricial (matriz de transferência de fluxo de energia radiante):

$$\begin{bmatrix} I_{SV}(F_{21} + \rho_3 F_{21(3)}) \\ I_{SV} \cdot F_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\rho_2} - \rho_3 F_{22(3)} & 0 \\ -F_{32} & \frac{1}{\rho_3} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} B_2 \\ B_3 \end{bmatrix} \quad (11)$$

onde $B_1 = I_{SV}$, irradiância difusa do céu sobre o plano vertical 1.

Por outro lado, substituindo B_1 por uma energia colimada proveniente do sol, outra fonte acaba aparecendo (ver Figura 3).

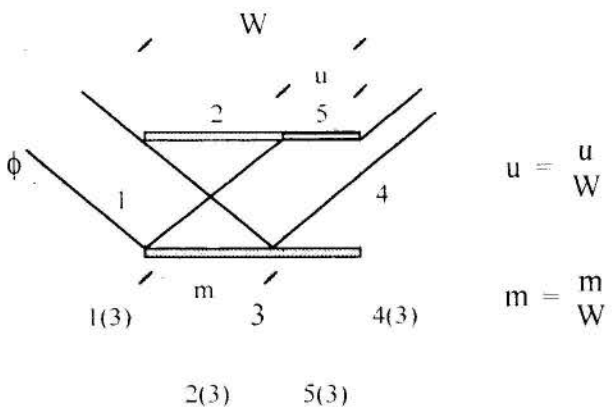


Figura 3: Cavidade da persiana com fluxo incidente colimado.

Neste caso, a matriz de transferência de energia radiante pode ser escrita como:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ r.I_{DV} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\rho_2} - \rho_3 F_{22(3)} & 0 & -\rho_3 F_{25(3)} \\ -F_{32} & \frac{1}{\rho_3} & -F_{35} \\ -\rho_3 F_{52(3)} & 0 & \rho_5\left(\frac{1}{\rho_5} - \rho_3 F_{55(3)}\right) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} B_2 \\ B_3 \\ B_5 \end{bmatrix} \quad (12)$$

onde,

$$r = \frac{\rho_2 . \operatorname{sen}(\phi - \psi)}{\cos\phi} \quad (13)$$

I_{DV} = irradiação direta sobre o plano vertical 1.

O cálculo dos fatores de forma foi enormemente simplificado pelo uso da clássica *"equação dos barbantes-cruzados"* (Hottel, 1954) que apresenta uma precisão bastante razoável quando o comprimento da lâmina é maior do que 10 vezes a sua largura, o que era o caso.

Tomando o fluxo inicial como 1, pode-se obter a Razão Radiosidade (Br), que consiste na razão das radiosidades das superfícies da persiana pela irradiância uniforme da abóbada celeste. Considerando I_{SV} = 1, os resultados de Br para as superfícies 2 (difusora) e 3 (especular) são apresentados na Figura 4, plotados com relação ao ângulo de inclinação da persiana ψ:

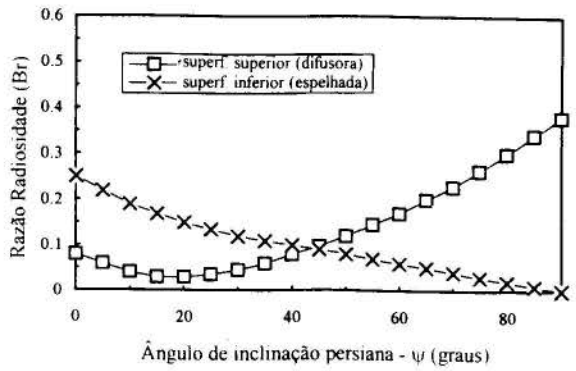


Figura 4: Variação da razão da radiosidade (Br) de acordo com o ângulo de inclinação da persiana (ψ).

Baseado nos resultados obtidos pela solução dos conjuntos de equações simultâneas (11) e (12), resolvidos usando-se a técnica padrão de Gauss-Siedel (Nash, 1990), com uma aproximação até a 3ª iteração, pode-se calcular a energia total transmitida (direta + refletida para dentro), absorvida e refletida (para fora) para um fluxo radiante difuso e colimado.

Para um fluxo radiante difuso, a transmissividade, T_d (hemisférica/hemisférica), absortividade A_d e refletividade R_d, são obtidas conforme a seguir:

$$T_d = \frac{2\left(F_{41} I_{SV} + \frac{W}{S}(B_2 F_{42} + B_3 F_{43})\right)}{I_{SV}} \quad (14)$$

$$A_d = \frac{2\frac{W}{S}\left(\frac{(1-\rho_2)}{\rho_2} + \frac{(1-\rho_3)}{\rho_3}\right)}{I_{SV}} \quad (15)$$

$$R_d = 1 - T_d - A_d \quad (16)$$

Para um fluxo radiante colimado, T_D (direcional /hemisférico), A_D e R_D são:

$$T_D = \frac{\frac{W}{S}\left(B_3F_{43} + (1-u)B_2F_{42} + u.B_5F_{45}\right)}{I_{DV} + p + (1-p) + \rho_2\left(1 - \frac{u}{b}\right)} \qquad (17)$$

$$A_D = \frac{\frac{W}{S}\left[\rho_3(1-\rho_5)(u.B_5F_{5\,53}) + (1-u)B_2F_{5\,23}\right) + \frac{(1-\rho_3)}{\rho_3}B_3 + \frac{(1-\rho_2)}{\rho_2}(1-u)B_2}{I_{DV} + (1-\rho_3)(1-p) + \rho_3(1-\rho_2)\frac{u}{b}} \qquad (18)$$

$$R_D = 1 - T_D - A_D \qquad (19)$$

O efeito da espessura das persianas foi levado em consideração conforme formulação proposta por Parmelee (Parmelee & Aubele, 1952).

- a razão W/S foi multiplicada pelo fator 1/(1-P);
- o valor de W/S corrigido foi utilizado nas Eq. (14), (15), (17) e (18) para a determinação da transmissividade e absortividade do sistema de persianas;
- a transmissividade e absortividade corrigidas foram finalmente obtidas por

$$T_D' = T_D(1 - P) \qquad (20)$$

$$A_D' = A_D(1 - P) + \alpha P \qquad (21)$$

onde $P = \dfrac{(D/S)\cos(\phi + \psi)}{\cos\phi}$ (22)

D é a espessura da lâmina da persiana.

Na próxima sequência de figuras a transmissividade e absortividade do sistema de persianas com superfície espelhada são plotadas de acordo com o ângulo de perfil ϕ (ângulo de penetração vertical tomado no plano perpendicular ao da abertura, ver Fig. 3) para diferentes ângulos de inclinação da lâmina ψ.

De acordo com a Figura 5, quanto maior for a inclinação da lâmina, maior é a transmissividade do sistema e grande parte da energia transmitida é dirigida ao teto. Isto poderia levar à conclusão de que este sistema de sombreamento e redirecionamento da luz solar é mais adequado a baixas latitudes.

Entretanto, estes valores não fornecem nenhuma informação a respeito da eficácia do sistema em termos da geometria da admissão da energia radiante e quão eficientemente as superfícies internas estão sendo utilizados como refletores secundários. Estes aspectos encontram-se descritos e analisados em maiores detalhes em Pereira (1995).

Não obstante, o aspecto mais importante a ser salientado é que a energia radiante extra transmitida pela persiana espelhada em comparação com uma persiana difusora é, em grande parte, direcionada para o teto, satisfazendo um dos objetivos básicos deste sistema (ver Figura 5 e 6).

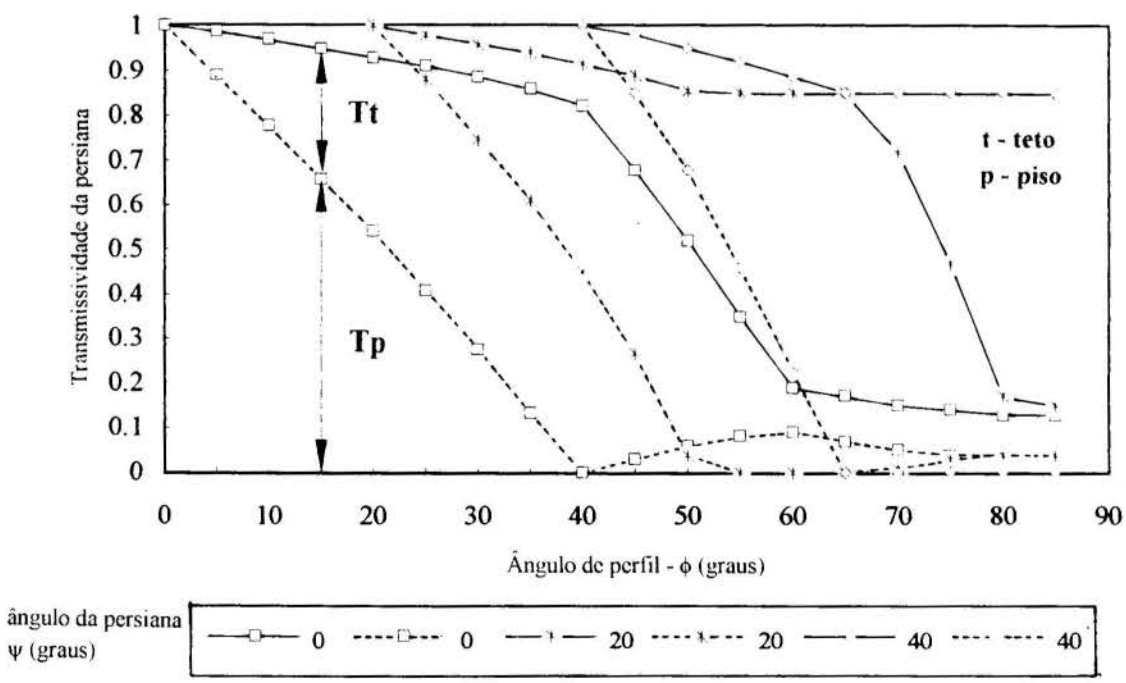


Figura 5: Transmissividade da persiana refletora de acordo com o ângulo de perfil (ϕ) para diferentes ângulos de inclinação da lâmina (ψ).

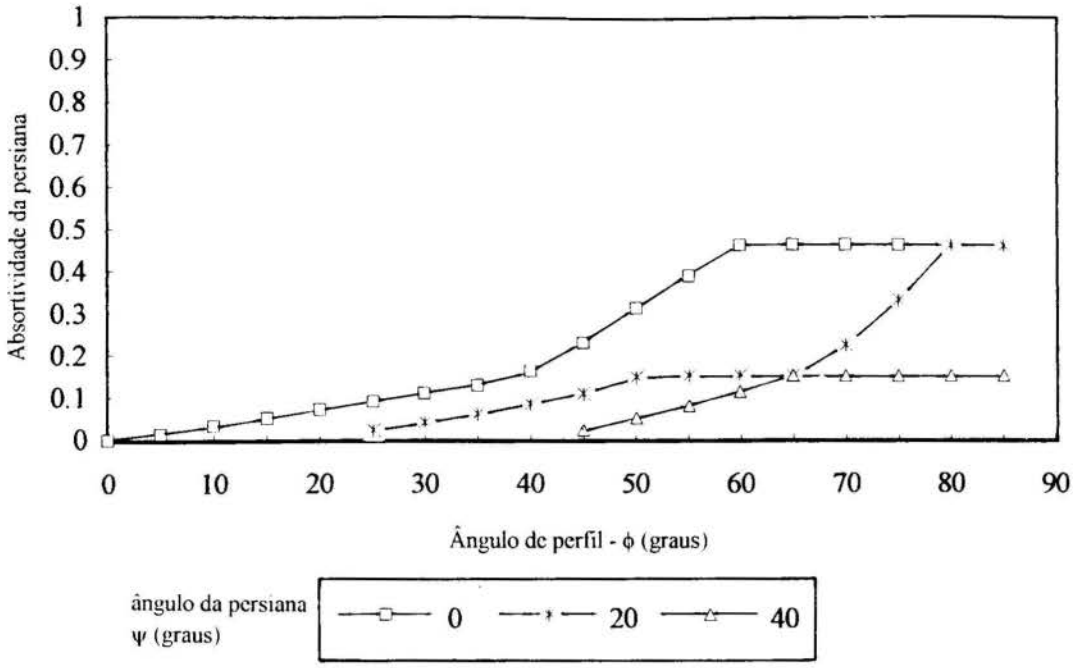


Figura 6: Absortividade da persiana refletora de acordo com o ângulo de perfil (ϕ) para diferentes ângulos de inclinação da lâmina (ψ).

COMPARAÇÃO COM VALORES EXPERIMENTAIS.

Os resultados obtidos através deste modelo foram comparados com dados experimentais adquiridos por um instrumento denominado Radiômetro de Abertura, cuja principal característica é sua habilidade de integrar a radiação total incidente sobre toda sua área, tornando-o capaz de determinar o ganho de calor solar através de aberturas de configuração complexa de uma maneira bastante prática; maiores detalhes podem ser obtidos em Pereira & Sharples, (1991).

Para efeitos da simulação matemática, considerou-se vidro duplo com transmissividade e absortividade estimados pela relação de Fresnel para KL igual a 0,10 e um um indice de refração do vidro de 1,52 (Stephenson & Mitalas, 1965; Jones, 1980; Furler, 1991). Para o cálculo do Ganho de Calor Solar (GCS) os fatores de retransmissão para o sistema persiana + vidro + vidro, aplicados no modelo, são dados por Jones (1980) como 0,041, 0,25 e 0,64 respectivamente.

Método de comparação. Os resultados simulados com o modelo e os obtidos experimentalmente foram comparados através da seguinte relação:

$$\text{Diferença Relativa, DR} = \left[\frac{(M - C)}{M}\right] * 100\% \qquad (23)$$

onde M é o Ganho de Calor Solar medido pelo Radiômetro de Abertura e C é o Ganho de Calor Solar calculado através do modelo apresentado.

As Figuras 7 e 8 apresentam as DR para medições realizadas em condições de céu claro, persianas horizontais (HM) e inclinadas de 25° (TM), plotadas de acordo com o ângulo de incidência da radiação solar. A maior parte dos valores se situam dentro de uma margem inferior a 10%, com uma DRMédia de 1,5% ± 3,7 e 2,7% ± 3,8 respectivamente para HM e TM.

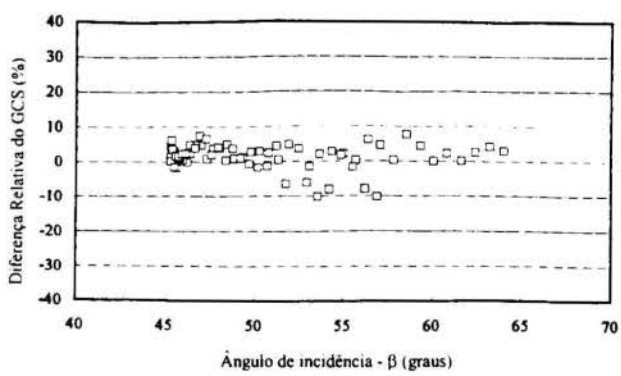


Figura 7: Diferença Relativa (%) para valores de GCS da persiana Horizontal Espelhada (HM).

Espera-se uma redução na precisão do modelo para condições de céu real devido à hipótese simplificada de distribuição uniforme.

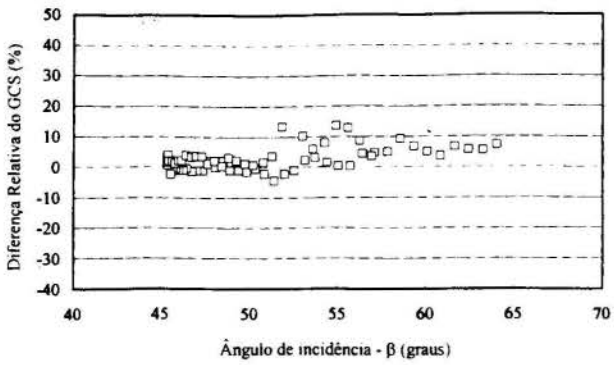


Figura 8: Diferença Relativa (%) para valores de GCS da persiana Inclinada Espelhada (TM).

CONCLUSÕES

O modelo apresentado neste artigo serve para o cálculo, do fluxo de energia transferida através de sistemas de persianas. O modelo é baseado no método da radiosidade e caracteriza-se pela habilidade em considerar trocas de energia radiante não apenas em envolventes difusoras, mas também em envolventes que apresentam superfícies com reflexão especular. Além de prática e conveniente, esta formulação para o método da radiosidade apresentou resultados bastante razoáveis comparados com dados obtidos experimentalmente.

REFERÊNCIAS

ASHRAE Handbook, 1993. *Fundamentals*. American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers, Atlanta

Eckert, E. R. & Sparrow, E. M., 1961. *Radiative heat exchange between surfaces with specular reflection*. International Journal of Heat Mass Transfer, Vol. **3**, pp.42-54.

Eckert, E. R. & Sparrow, E. M., 1961. *Radiative heat exchange between surfaces with specular reflection*. International Journal of Heat Mass Transfer, Vol. **3**, pp.42-54.

Furler, R. A., 1991. *Angular dependence of optical properties of homogeneous glasses*. ASHRAE Transactions, Vol. **97**(Part 2), pp.1129-1137.

Hottel, H. C., 1954. *Radiant-heat Transmission (Chapter 4)*. In: McAdams, W.H. (Ed.), Heat Transmission. (3rd ed.). McGraw-Hill Book Co., NewYork.

IES Handbook, 1995. *Lighting Handbook: Reference and Application*. Ed. Mark S. Rea. (8th ed.). Illuminating Engineering Society of North America, New York.

Jones, R. H. L., 1980. *Solar radiation through windows - theory and equations*. Building Services Eng. Research & Technology, Vol. **1**(2), pp.83-91.

Moore, F., 1993. *Environmental Control Systems: Heating, Cooling and Lighting*. McGraw Hill Book Co., New York.

Nash, J. C., 1990. *Compact numerical methods for computers: Linear algebra and function minimisation*. (2nd ed.). Adam Hilger Co., Bristol.

Parmelee, G. V. & Aubele, W. W., 1952. *The Shading of Sunlit Glass: An Analysis of the Effect of Uniformily Spaced Flat Opaque Slats*. ASHVE Transactions, Vol. **58**, pp.377-398.

Pereira, F. O. R. & Sharples, S., 1991. *The development of a device for measuring solar heat gain and shading coefficients of windows in scale models*. Energy and Buildings, Vol. **17**, pp.271-281.

Pereira, F.OR., 1995. "Considerações geometricas para o projeto e controle de um sistema de persianas espelhadas". *Anais do III Encontro Nacional e I Encontro Latino-Americano de Conforto no Ambiente Construido*, Gramado/RS, pp. 529-534

Sparrow, E. M.; Eckert, E. R. & Jonsson, V. K., 1962. *An Enclosure Theory for Radiative Exchange Between Specularly and Diffusely Reflecting Surfaces*. Transactions of ASME: Journal of Heat Transfer, pp.294-300.

Stephenson, D. G. & Mitalas, G. P., 1965. *Solar transmission through windows with venetian blinds*. In: Proc. CIE Intersessional Conference: "Sunlight in Buildings". Bouwcentrum International, Newcastle-upon-Tyne, UK, pp.151-166.

SUMMARY

This paper presents a mathematical model for simulating the radiant behaviour of louvre systems that incorporate specularly reflecting surfaces. An accurate computation of the resultant proportions of the radiation incident upon a fenestration system is needed to assess the final thermal conditions and daylight distribution in the inner space. The proposed method is based on a practical and convenient formulation for the radiosity method, which allows for the consideration of specularly reflecting surfaces as well as diffuse ones. This extended formulation is possible by using aspects in optics: plane mirrors reflect radiant energy as they came from an image located behind the mirror. Calculated values were compared with measured data. The mean relative differences between theorectical and empirical data were around 2 to 4 % ± 4.

RECURSOS NATURAIS DE ENERGIA

Paulo César da Costa Pinheiro
Departamento de Engenharia Mecânica da UFMG
Av. Antônio Carlos 6627, 31270-901 Belo Horizonte, MG
E-Mail: PINHEIRO@ORACULO.LCC.UFMG.BR

SUMÁRIO

A finitude dos recursos naturais da Terra é obvia, mas só é lembrada durante as "Crises Energéticas". A humanidade vem consumindo as reservas energéticas armazenadas, em ritmo exponencial, há mais de dois séculos. Nós fomos educados acreditando que esta garantia de consumo é perpétua. O que se levou milhões de anos para ser formado, está sendo hoje queimado a uma taxa milhões de vezes superior à da sua formação. Em breve a demanda de combustíveis deverá superar a oferta e deverão ser encontradas soluções para esta lacuna. Este trabalho apresenta uma análise do comportamento do consumo energético mundial em relação aos recursos naturais, renováveis e não renováveis, e apresenta as soluções disponíveis para a continuidade do desenvolvimento da humanidade, à luz do atual nível de conhecimento.

INTRODUÇÃO

Uma das medidas do padrão de vida de um país é o seu Produto Interno Bruto (PIB). A análise de dados mundiais mostra uma relação direta entre a variação do consumo de energia e o PIB, *per capita* (Häfele, 1974; Cook, 1971), chamada elasticidade da renda (Goldemberg, 1991). A energia, ao lado das matérias-primas, e da mão-de-obra, é um dos insumos básicos do desenvolvimento econômico. Ela permite a transformação de materiais e a produção de bens e serviços que asseguram a subsistência e conforto da população. Assim, a disponibilidade de energia é necessária para o desenvolvimento e crescimento industrial. A humanidade recebeu uma dotação inicial de exergia na forma de combustíveis fósseis, formados a partir da matéria orgânica, matéria animal, e talvez devido à sínteses inorgânicas (Ferreira, 1981). Entretanto, ela vem, há mais de dois séculos, consumindo as reservas energéticas armazenadas, em ritmo exponencial. Nós fomos educados acreditando que a garantia deste consumo é perpétua. O que se levou milhões de anos para ser formado, está sendo hoje queimado a uma taxa milhões de vezes superior à de sua formação.

Até agora a crise energética foi só um fato histórico, mas suas conseqüências podem ser dramáticas, se a humanidade não desenvolver, com urgência, novos recursos energéticos. O desenvolvimento tecnológico avança ao mesmo tempo que os recursos naturais se esgotam. Como assegurar o desenvolvimento da humanidade com a exaustão dos recursos?

BALANÇO ENERGÉTICO DA TERRA

Chamamos de meio ambiente, ou biosfera, a região próxima da superfície da terra onde vive o homem. O sistema Sol-Terra-Espaço não é estático, existindo um fluxo permanente de energia no meio ambiente. As várias diferenças de potencial são as diferentes formas de energia à disposição da humanidade. O balanço energético da terra é apresentado na figura 1.

1. Energia disponível. O vetor básico da exergia é a radiação solar, única e essencial. Apenas uma pequena fração da energia provêm do interior da terra, das marés (sistema gravitacional Terra-Lua-Sol) e dos elementos radioativos. Segundo Hubbert (1971) a energia total disponível na superfície da terra é devido a:

1.1. Energia solar. O fluxo médio de energia solar incidente acima da atmosfera, à distância média da Terra ao Sol, é de 1353±1,5% W/m^2 (constante solar). Assim, a radiação solar interceptada sobre o plano diametral da Terra (1,275.10^{14}m^2) é 173.10^{15} W (= 173PW = 0,17EW).

1.2. Energia geotérmica. A taxa média de geração geotérmica, em terra e sob o mar é 0,63 W/m^2. Assim, na superfície da Terra (5,101.10^{14} m^2) a energia geotérmica é 32.10^{12} W (= 32 TW). A esta adiciona-se a energia de convecção por vulcões e fontes termais, igual a 0,3 TW.

1.3. Energia maremotriz. Aproximadamente 3TW.

1.4. Energia fóssil. A energia oriunda da queima de combustíveis fósseis e nuclear (1992) é cerca de 10,7TW (DOE, 1996)

Assim, a potência total disponível sobre a superfície da terra é 173 PW, dos quais 99,98% são oriundos da energia solar.

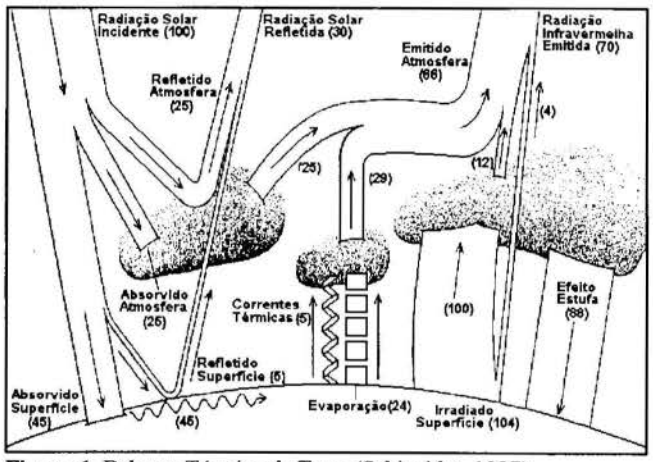


Figura 1. Balanço Térmico da Terra (Schineider, 1987).

2. Perdas de Energia. Cerca de 30% da energia solar incidente (52PW) é refletida pelas nuvens (18%), atmosfera e aerossóis (7%), superfície da terra (5%) e difundido para o espaço, em forma de radiação eletromagnética de onda curta. 25% da energia solar é absorvida pela atmosfera e nuvens, e 45% pela superfície da terra e oceanos, e convertida diretamente em calor à temperatura ambiente (energia não aproveitável); 24% (41PW) é consumida pelo ciclo hidrológico da água (evaporação, convecção e precipitação). A circulação oceânica (correntes, ondas), e os ventos, representa 3TW (0,002%). Toda esta energia acaba sendo irradiada e dissipada para o espaço (Schineider, 1987; Hubbert, 1971).

3. Energia Útil. Da energia solar incidente sobre a superfície da terra e mares, cerca de 40 TW (0,023%) é capturado pela biomassa através da fotossíntese. A fotossíntese é o processo pelo qual a biomassa utiliza a energia solar para converter CO_2 em carbohidratos, fixando o carbono e liberando oxigênio. A eficiência do processo de

fotossíntese é cerca de 0,15%. Apesar da pequena eficiência, são fixados na biomassa terrestre e aquática, cerca de 200Gton carbono/ano, estocando energia solar, e produzindo matéria prima, alimentos e combustível. Esta contribuição é essencial para a humanidade, pois dela dependem os seres vivos superiores.

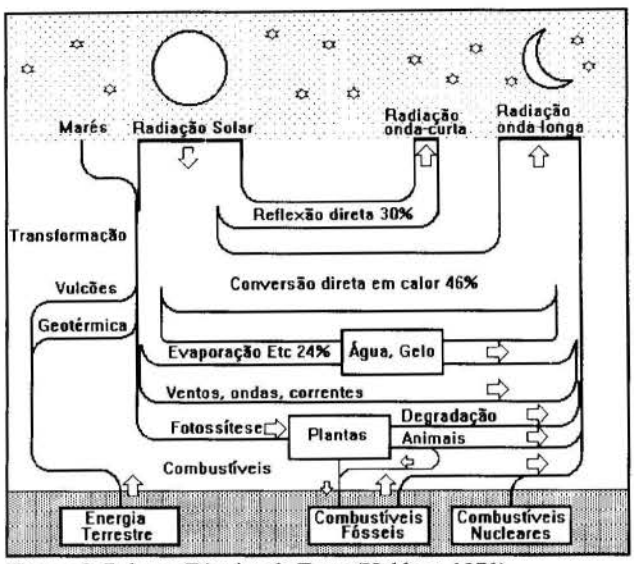


Figura 2. Balanço Térmico da Terra (Hubbert, 1971).

A biomassa formada, segue seu ciclo de vida, morre e se decompõe, dissipando a energia acumulada. Somente uma pequena fração da matéria orgânica permanece depositada em tufeiras, ou outros ambientes anaeróbicos, em condições de oxidação incompleta e de transformação (decay). Esta matéria orgânica, acumulada nas rochas sedimentares desde o período Cambriano evoluiu, se transformando nos combustíveis fósseis: carvão, petróleo, gás natural e xisto betuminoso. É sobre esta energia solar, armazenada quimicamente durante 600.000.000 de anos que a humanidade tem sacado com intensidade crescente. A formação de combustíveis fósseis continua ainda hoje, juntamente com a formação das rochas sedimentares, só que esta formação é lenta e imperceptível.

RECURSOS ENERGÉTICOS MUNDIAIS

A quantidade de combustível recuperável em uma jazida, depende de fatores econômicos (preço combustível vs. custo exploração). A quantidade de combustíveis disponível na terra consiste na soma das reservas comprovadas e das reservas estimadas adicionais. As reservas comprovadas são avaliadas por comparação com outros campos em produção, a partir de sondagem, amostras de rocha e do fluído. O conhecimento atual permite uma boa precisão na avaliação destas reservas, mas nunca o valor exato.Assim, a dimensão das reservas finais (recursos últimos) de petróleo, gás natural e carvão é conhecida com satisfatória precisão. Entretanto, a avaliação dos reservas estimadas totais é imprecisa. Devido a incerteza das reservas estimadas, cada avaliação dos recursos recuperáveis apresenta resultados diferentes.

A tabela 1 apresenta uma estimativa (1990) dos recursos mundiais não renováveis (WEC, 1993). Pode-se notar que o carvão é o principal combustível fóssil, e, pelas atuais taxas de consumo, possui reservas comprovadas para 255 anos, devendo sobreviver aos demais combustíveis por larga margem. À atual taxa de exploração, as reservas de petróleo são suficientes para 45 anos. Se a taxa de crescimento da demanda mundial for 3%, o que não é uma expectativa pessimista, as reservas comprovadas e inferidas serão suficientes para apenas 30 anos, e somadas as reservas que se espera descobrir, não serão suficientes para os próximos 50 anos.

Tabela 1. Reservas Mundiais (1990) de Recursos Energéticos Não Renováveis (Gtep) (WEC, 1993).

COMBUSTÍVEL	Comprovadas		Adicionais Estimadas	
	Gtep	Anos	Gtep	Anos
Carvão	560	255	345	155
Gás Natural	110	60	104	55
Petróleo	137	45	78	25
Óleo de Areias e Xistos	-	-	90	30
Total Energia Fóssil	807	-	617	-
U_3O_8 ($60/kg)				
Reator Convencional	32	55	14	25
Reator Breeder	1920	3300	840	1500

Gtep = 10^9 toneladas equivalentes de petróleo = $4{,}18.10^{19}$J

A terra já se encontra quase completamente mapeada, e localizar uma nova jazida de petróleo é cada vez mais improvável. As jazidas de alto teor já foram descobertas e possivelmente extraídas. Restam somente jazidas menores, mais pobres, mais profundas, menos acessíveis e de exploração mais cara. As futuras descobertas serão em regiões polares, em condições adversas, em regiões de difícil acesso, no mar em águas profundas e com perfurações profundas, de alto custo da produção. Acredita-se que as reservas finais (últimos recursos recuperáveis) são aproximadamente 200Gton, dos quais 78Gton economicamente viáveis. Estes 200Gton restantes, exigirão investimentos crescentes e grandes avanços tecnológicos em prospecção e extração. Assim, tais descobertas só serão economicamente viáveis com o aumento do preço do petróleo.

A recuperação das reservas poderá aumentar com a utilização de tecnologias de extração mais sofisticadas. A taxa atual de recuperação de petróleo é cerca de 30%. Assim, um ganho de 1% na recuperação aumenta as reservas comprovadas em $4{,}6.10^9$Gtep.

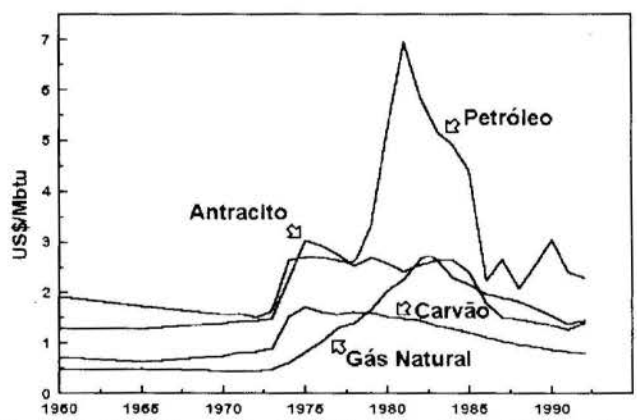


Figura 3. Preço dos combustíveis fósseis nos EUA (Dólar de 1987 constante) (U.S. Energy Information Administration, 1995)

Os países industrializados, vem registrando uma queda no consumo energético, graças a um aumento da eficiência energética. Apesar da diminuição do consumo, das descobertas de novas jazidas e da reavaliação das antigas, as reservas de petróleo economicamente viáveis, começaram a diminuir a partir de 1970. Acredita-se que em 10 anos, a demanda mundial de petróleo exceda a produção e que o preço do petróleo aumente continuamente.

Este é o primeiro caso de recurso mineral, em que novas tecnologias e novas descobertas juntas, já não suplantam a tensão natural para aumento de custos devido ao progressivo empobrecimento do minério e o deslocamento da produção. A era o petróleo caminha para o fim.

O CONSUMO MUNDIAL DE ENERGIA

Historicamente, o consumo de energia aumentou continuamente, desde o aparecimento do homem na terra (Cook, 1971). O homem primitivo utilizava o fogo para cozinhar e se aquecer, consumindo cerca de 10MJ/dia (per capita). Este homem evolui, se tornou agricultor e, no início da era cristã, consumia cerca de 50MJ/dia. Com o advento da máquina a vapor no século 18, iniciou-se com o carvão a utilização de combustíveis fósseis, e o consumo atingiu 300MJ/dia nos países industrializados. No século 19 iniciou-se o consumo de petróleo e gás natural. A utilização da energia nuclear data dos anos 50. Hoje, nos EUA consome-se cerca de 900MJ/dia (per capita).

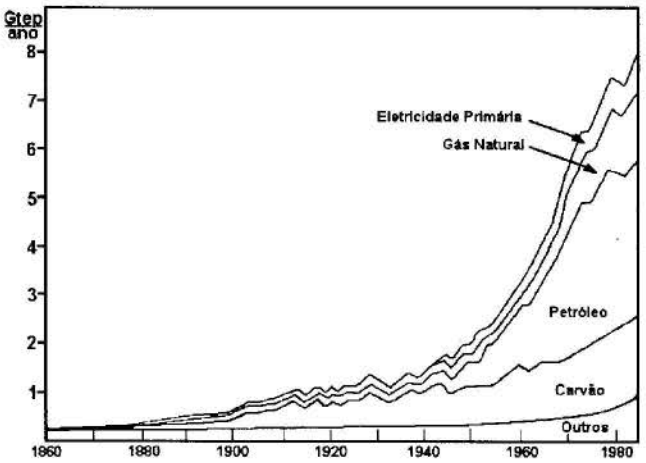


Figura 4. Consumo Mundial de Energia Primária.

No período de 1900 a 1995 os combustíveis fósseis supriram 90% do consumo energético mundial. Em 1900 o principal combustível era o carvão, mas, a matriz energética mudou, e hoje o mundo depende do petróleo e gás para quase 60% do suprimento energético. O consumo mundial de energia é atualmente (1994) 8,8 Gtep/ano (11,7TW) (DOE, 1996), uma quantidade relativamente pequena em relação à estimativa de recursos (807+617Gtep), mas, a grande dependência do petróleo e gás é preocupante.

O petróleo é consumido principalmente em alguns países de grande poder econômico, tecnológico e militar. O consumo do grupo dos 7 (EUA, Japão, Alemanha, França, Itália, Inglaterra e Canadá) atinge cerca de 31.10^6barril/dia (barril = $0,15898m^3$), cerca de 50% do consumo mundial. Estes países não possuem reservas de petróleo suficientes que garantam sua demanda por longo tempo (tabela 2).

Tabela 2. Consumo Mundial de Petróleo (Oil & Energy Trends, Maio 1992).

PAÍS	CONSUMO		RESERVAS	
	10^6barril/dia	barril/hab.ano	10^9 barris	Anos
EUA	16,180	23,3	32,1	5,7
Ex-URSS	8,435	10,6	57,0	15,0
Japão	5,295	15,6	0,1	0
Alemanha	2,705	12,3	0,4	0
China	2,405	0,8	24,0	27,3
França	2,010	12,9	0,2	0
Itália	1,895	11,9	0,7	0
Inglaterra	1,760	11,3	4,0	6,2
Canadá	1,625	22,0	7,9	13,3
México	1,585	6,6	51,3	88,7
Coréia do Sul	1,185	10,1	0	0
Brasil	1,147	3,4	8,1	19,3

Enquanto o consumo de petróleo se concentra em países que não têm reservas para sustentá-lo, as grandes reservas se concentram em outros poucos países, que tem condições de exportar o produto. Cerca de 70% das reservas mundiais de petróleo se concentram na península arábica, e os países da OPEP controlam o mercado.

A grande dependência da sociedade moderna ao petróleo para transporte, aquecimento, geração de eletricidade e petroquímica, provoca atualmente uma situação crítica a respeito da utilização de combustíveis fósseis. Uma mudança do petróleo para o carvão pode aliviar um pouco o problema, mas não é esperada nenhuma queda substancial na demanda de petróleo nas próximas décadas. Além disto, as grandes jazidas de carvão também estão concentradas em poucos países.

Espera-se que o consumo mundial de energia aumente consideravelmente no próximo século (Häfele, 1974). O consumo total de energia deve continuar crescendo e o petróleo e gás natural continuarão ocupando destaque na matriz energética do século XXI. Mesmo com a oferta de outras fontes de energia, o consumo de petróleo continua a crescer. O petróleo esgota-se ao mesmo tempo que sua demanda cresce. O petróleo não dá duas safras, não é possível esperar o petróleo acabar para se tomar providências.

EFEITO ESTUFA

A figura 6 mostra que a terra aqueceu cerca de 0,5°C desde 1860, e que as temperaturas hoje são as mais altas já registradas (Jones, 1995). Este aquecimento é parcialmente devido ao aumento da luminosidade do sol (Kerr, 1996), mas, sobretudo devido ao efeito estufa.

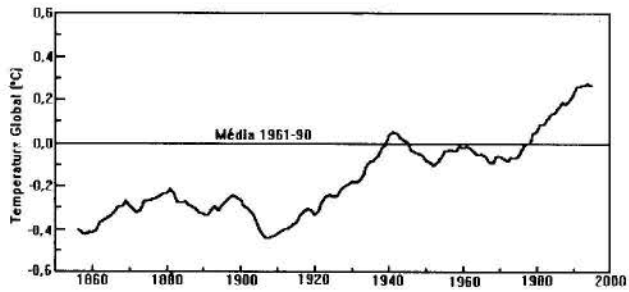


Figura 6. Variação da temperatura da terra 1856-1995.

O efeito estufa é o aquecimento da terra devido ao aumento do teor de CO_2, NOx, CH_4, H_2O e CFC (compostos clorofluorcarbono) na atmosfera. O teor destes gases tem aumentado devido ao aumento do consumo de energia, oriunda principalmente de combustíveis fósseis. O CO_2 e o vapor-d'água são transparentes à radiação solar, que atinge e aquece a superfície da terra, mas absorvem radiação infravermelha emitida pela superfície aquecida, aumentando a temperatura atmosférica. O CFC destrói a camada protetora de ozônio, aumentando a quantidade de radiação ultravioleta que atinge a superfície da terra.

O CO_2 é o principal responsável pelo efeito estufa, e a queima de combustíveis fósseis é a principal fonte de CO_2 (tabela 3). O EUA é responsável por 25% da emissão mundial de CO_2, a ex-URSS 19% e a China 9%. Somente estes 3 países produzem mais de 50% do CO_2 mundial. Somente uma empresa, UK's Central Electricity Generating Board, é responsável por 1% da produção mundial de CO_2.

Tabela 3. Contribuição do efeito estufa (1990).

FONTE	Emissão de CO_2		Efeito Estufa (%)
	GtonC/ano	%	
Combustíveis Fósseis	5,14	84,3-66,8	47,6-37,7
Carvão	2,08	34,1-27,0	19,3-15,3
Petróleo	2,22	36,4-28,8	20,6-16,3
Gás	0,84	13,8-10,9	7,8-6,2
Fabricação Cimento	0,13	2,1-1,7	1,2-1,0
Desflorestamento e uso do solo	0,8-2,4	13,1-31-2	7,2-17,6
Total	6,1-7,7	100	57
CFC			25
CH_4			12
NOx			6

A análise de bolhas de ar aprisionadas no gelo da antártica, mostrou que a concentração de CO_2 na atmosfera na era glacial (há 18.000 anos) foi 200 ppm. Durante os últimos 8000 anos o teor manteve-se aproximadamente constante em 280 ppm, correspondente a 594.10^9ton de Carbono na atmosfera. Nos últimos 200 anos, o teor de CO_2 na atmosfera, crescendo cerca de 1% a.a. (figura 7).

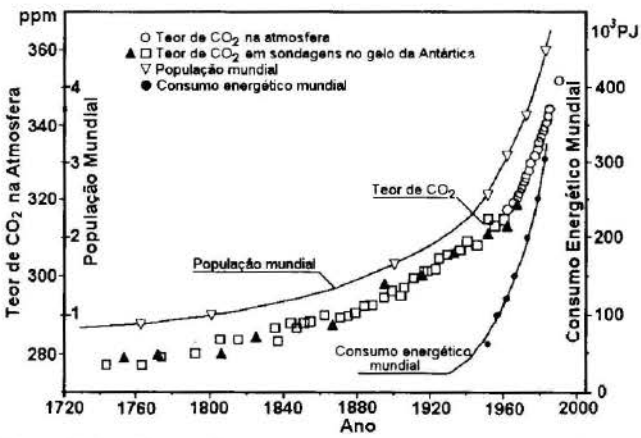


Figura 7. Crescimento demográfico, consumo energético mundial e do teor de CO_2 na atmosfera (Ficher, 1995).

As mudanças no regime de chuvas nos últimos anos indicam uma grande mudança climática. No próximo século, o teor de CO_2 deve dobrar, aumentado a temperatura média da terra em cerca de 3°C, e o efeito estufa deve provocar mudanças climáticas mais extremas desde o fim da era glacial. O aquecimento não é problema para o homem, que pode se adaptar a esta temperatura. A questão é que este aquecimento modificará a umidade do ar, a distribuição de nuvens e as fronteiras de neve e gelo, afetando o clima, uso da terra, agricultura, nível dos oceanos, e muitos aspectos da vida de todos os povos. Devido ao aquecimento da terra, o nível médio dos oceanos aumentou 15 cm no último século (Poulallion, 1990). Com o aumento da temperatura, acontecem dois efeitos: a deglaciação continental (degelo das geleiras e placas polares) e dilatação da água. Apesar de não existir uma correlação direta entre o aquecimento global e o nível dos oceanos, o nível dos mares deverá aumentar entre 20 e 70 cm (Kjerfve e Lacerda, 1992).

O efeito real do aumento do teor de CO_2 na atmosfera ainda é desconhecido e sujeito a especulações. Alguns acreditam que um pequeno aquecimento, pode até ser benéfico, com estações mais longas nas zonas temperadas, mais chuvas nas áreas secas, aumentar os processos naturais da biosfera, e retardar uma nova era glacial. O aumento do teor de CO_2 pode aumentar a produtividade mundial de grãos. Entretanto, enquanto alguns países de zona temperada podem obter algum ganho de produtividade, muitos países de zona tropical e subtropical parecem ser mais vulneráveis aos impactos do aquecimento global (Rosenzweis, 1994). Entretanto, os modelos matemáticos atuais não permitem prever com precisão estes efeitos climáticos.

Tabela 4. Emissão de CO_2 no Setor Industrial (1991) (Olade, 1993)

PAÍS	Per capita	PIB
	ton CO_2/hab	US$/ton CO_2
EUA	3,5	6450
Canadá	3,6	5758
Japão	2,3	12040
França	1,7	12049
China	0,8	389
América Latina	0,6	3431
Brasil	0,4	6341

Visando reduzir o efeito estufa, os países desenvolvidos procuram reduzir as emissões de poluentes, estabelecendo leis rigorosas que taxam as emissões de CO_2. As pressões ambientalistas dos países ricos tendem a aumentar sobre os países em desenvolvimento, sobretudo vinculando empréstimos internacionais à análise do impacto ambiental dos projetos.

PERSPECTIVAS ENERGÉTICAS FUTURAS

Diante deste cenário de esgotamento das fontes não renováveis de energia, é necessário encontrar, novas formas de garantir o suprimento energético e a produção industrial da humanidade no futuro próximo. Não existem recursos energéticos suficientes para o mundo inteiro manter o *status quo* atual de alto consumo energético. Assim, são inevitáveis modificações no perfil atual de demanda e uso final de energia.

O World Energy Council (WEC, 1993) examinou 4 cenários de suprimento de energia até o ano 2020: cenário ecologico, cenário de baixa demanda energética (475 EJ), cenário de referência (564 EJ) e cenário de alta demanda energética (722 EJ). No cenário ecológico a biomassa poderia contribuir com 14% e as outras fontes renováveis (solar, eólica etc) com outros 7%. No caso de um cenário de alta demanda com 8% e 5% respectivamente.

A fusão nuclear está prestes a se concretizar, e as previsões pessimistas a situam dentro de 100 anos. Apesar de fonte não-renovável, é virtualmente inesgotável, com poucos inconvenientes e pouca poluição. A fusão garantirá uma disponibilidade energética para todo o futuro previsível. O limite de seu uso será o calor de rejeito, que não deve ultrapassar 5% do calor recebido do sol, devido ao efeito estufa. O problema energético da humanidade, é assim, transitório, aguardando o desenvolvimento da fusão, e até lá algumas soluções são vislumbradas:

1) Conservação. Para prolongar o prazo de uso dos recursos naturais é necessário aumentar o rendimento das máquinas atuais e conservar energia. O progresso tecnológico permitirá construir máquinas de menor consumo, além de menores e mais leves (economia de energia e material na construção). A conservação de energia; adequação das fontes energéticas ao uso final de energia, minimizando o consumo exergético; reciclagem do lixo, de modo a reciclar a energia incorporada etc. Existe ainda há um grande potencial de desenvolvimento neste sentido.

2) Substituição por outra fonte fóssil. A análise da tabela 1 mostra que, devido à disponibilidade, a curto prazo o perfil de consumo tende se deslocar para o carvão e nuclear. Entretanto, as razões econômicas se contrapõem às questões ecológicas e de segurança. A exploração do carvão depende de projetos de longa maturação, além de estar sujeita a uma legislação rígida de proteção ambiental. Além disto, a China, maior produtor mundial de carvão (1 bilhão de ton/ano), devido ao seu desenvolvimento econômico, deve ser transformar a curto prazo de exportador em grande importador. O desenvolvimento da energia nuclear nos Estados Unidos tem diminuído. Após o acidente em Three Miles Islands, o acréscimo de medidas de segurança impostas pelo

governo elevaram o custo das centrais nucleares para US$4200/kW. O desenvolvimento dos reatores regenerativos (breeder) tornará a energia nuclear bastante competitiva.

3) Substituição por fontes renováveis. Os Caminhos Suaves da Energia utilizam as tecnologias de recursos renováveis e os lucros da energia (uso direto da energia solar, do vento, da conversão da biomassa), recuperando os recursos renováveis e adequando os tipos de energia à natureza do seu último uso. A energia solar incidente sobre a superfície terrestre é 10^4-10^6 vezes o atual consumo energético. Assim, em teoria, a energia solar poderia suprir as atuais e futuras necessidades energéticas do homem. Entretanto, esta energia é de baixa densidade e, por conseqüência, são necessários grandes investimentos para captar uma quantidade importante de energia. Além disto, devido à rotação da terra, a incidência solar é intermitente, o que obriga o armazenamento de energia. Hubbert (1971) apresenta uma análise da possibilidade do uso das várias fontes de energia renováveis (solar direta e indireta, marés, geotérmica) no suprimento energético mundial. O potencial mundial utilizável de energia hidráulica é de 14000TWh/ano, que é equivalente a 120Gtep em 100 anos, aproximadamente o conteúdo energético das reservas de gás natural. Entretanto, somente 15% deste potencial é hoje utilizado, sobretudo devido aos grandes investimentos necessários e às restrições ambientais.

4) Estilo de vida. O progresso da humanidade não depende unicamente do progresso econômico. Energia, tecnologia e dinheiro são meios e não fins. A quantidade de energia consumida não mede o bem estar da humanidade, e a qualidade de vida não se mede somente de acumulação de bens de consumo e salários. Os valores espirituais, a saúde, a educação e cultura são riquezas não quantificáveis. O uso da energia é função do estilo de vida, e uma mudança de atitudes pode mudar radicalmente a estrutura do consumo de energia. Isto pode ser realizado pela realocação do uso da energia, estabelecendo quais produtos e serviços são realmente necessários para a manutenção da saúde e bem estar, e pela conservação de energia na indústria, transporte, residências e comércio.

O CASO BRASILEIRO

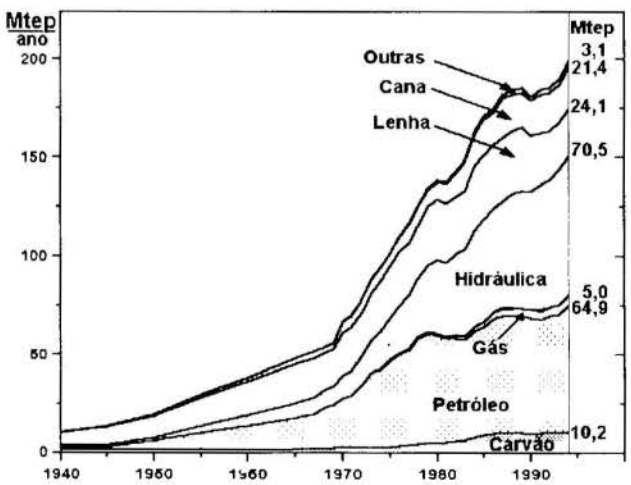


Figura 8. Consumo Nacional de Energia Primária.

A figura 8, realizada a partir de dados dos Balanço Energéticos Brasileiro de 1967 a 1995, mostra evolução do consumo de energia no Brasil. O consumo total de energia (1994) foi de 199 Mtep, com um crescimento na década 84-94 de 21% (Brasil, 1995). Pode-se verificar que o perfil de demanda nacional é muito diferente do mundial, contando com grande participação de fontes renováveis (hidráulica, lenha e cana). No balanço energético mundial, a energia hidráulica participa com 5%. O Brasil tem um perfil energético muito particular: a eletricidade é responsável por 40% do balanço energético. A potência elétrica instalada é 55 GW (1994), dos quais 94% são gerados por hidroelétricas, e o resto por carvão, óleo diesel, gás natural nuclear. O Brasil possui um enorme potencial hidroelétrico ainda não explorado, estimado em 150GW, mas a maior parte deste potencial encontra-se na região norte, sendo difícil o seu transporte até os centros consumidores.

Na figura 9 (Brasil, 1995, IBGE, 1996) verifica-se que entre 1975-1995 a variação do consumo de energia elétrica, é sempre maior do que a variação do PIB, que é maior que a variação do consumo total de energia. Este aumento do consumo de eletricidade é sobretudo notado nos setores residencial e comercial. Assim, a elasticidade da renda (Goldemberg, 1991) pode ser questionada, pois com o aumento do poder aquisitivo, as populações pobres tornam-se consumidoras, e mudando-se o perfil de consumo.

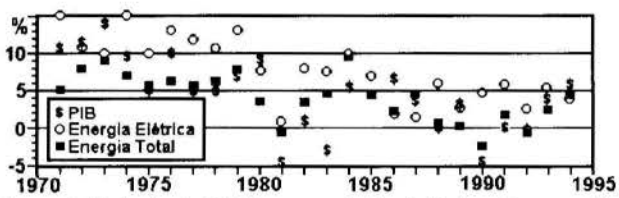


Figura 9. Variação do PIB, Consumo de Eletricidade e Consumo Total de Energia no Brasil.

Para assegurar o crescimento anual de 4 a 5% no consumo de eletricidade, é necessário instalar 2,5-3,5 GW/ano, e investimentos de US$ 6 bilhões/ano. É conhecida a excassez de recursos públicos para investimento no setor. Em 1993, a Eletrobrás investiu somente US$ 1,4 bilhão em vez dos US$ 2,3 bilhões previstos.

O petróleo participa com 35% do Balanço Energético Nacional. A produção atual (1996) é 824.000 barris/dia, a capacidade de refino 1450.000 barris/dia e as reservas confirmadas 4,3 Bilhões de barris e as potenciais 10,3 bilhões de barris (80% Bacia de Campos), 10 anos do atual consumo de 1,3 Milhões de barris/dia. Apesar do esforço para aumentar a produção, o Brasil continua importando cerca de 42% do consumo. Em 1995, o Brasil importou mais de 500,000 barris/dia de petróleo e 200,000 barris/dia de produtos refinados.

Ao contrário dos combustíveis fósseis, o Brasil detem reservas consideráveis de urânio e outros minerais estratégicos (tório e terras raras). A produção atual de U_3O_8 é 43000 ton/ano, ao custo de US$44,00/kg (US$1,9 bi/ano). Atualmente o Brasil consome 160 ton/ano de U_3O_8. Com a entrada em operação de Angra II prevista para 1998, este consumo subirá para 460 ton/ano. As reservas geológicas de urânio são 301.490 ton de U_3O_8, sendo 192.540 (medidas e indicadas) e 108.950 ton (inferidas).

CONCLUSÕES

Os dias de energia barata estão por acabar, e o custo tem aumentado juntamente com a demanda. Nos próximos anos certamente continuará a aumentar o consumo de energia, não somente devido ao crescimento dos países industrializados, como também dos países em desenvolvimento. A lacuna entre o suprimento e a demanda deverão ser supridos por fontes renováveis, juntamente com reatores nucleares mais avançados. Deverão ser realizados grandes investimentos de pesquisa e desenvolvimento de energia renováveis, a fim de realizar no futuro um largo emprego destas energias, em bases econômicas e ecológicas aceitáveis. O desenvolvimento de novas tecnologias podem demorar 10 a 20 anos.

Existe uma necessidade urgente de se adotar estratégias de conservação de energia, tanto a nível doméstico quanto comercial e

industrial, de modo a se acomodar a matriz energética aos novos tempos. Assim, é hora de tomarmos consciência do desperdício de recursos, e incorporar a conservação dos recursos naturais em nosso estilo de vida.

É necessária a minimização do consumo de combustíveis fósseis e promoção na maior escala possível de sistemas energéticos de alto rendimento, de dispositivos de cogeração etc. Além disso, deve-se racionalizar os investimentos na expansão da oferta de energia, otimizar o parque produtor de energia, reduzir os impactos decorrentes da produção, transformação e uso da energia, reduzir os desperdícios de energia. Como estratégia, devido ao baixo preço atual, é recomendado aumentar a importação de petróleo, e reduzir a exploração, guardando as reservas nacionais para o futuro. A disponibilidade energética não é garantia para o desenvolvimento, se a energia não for utilizada de modo a assegurar o crescimento econômico e social.

Hoje a indústria encontra-se colocada frente ao dilema de encontrar uma fonte energética econômica, confiável e ecologicamente correta, capaz de suprir a sua vida útil. Uma vez que a implantação de uma nova planta convencional demora de 5 a 12 anos e as decisões tomada hoje podem influenciar suas vidas por décadas.

REFERÊNCIAS

BRASIL,1995. Ministério de Minas e Energia. Balanço Energético Nacional. Brasília, 141p.

COOK Earl. 1971. The Flow of Energy in an Industrial Society. Scientific American, v.244, n.3, p.135-144, Setembro 1971.

DOE. Department of Energy. 1996. http://www.eia.doe.gov

FERREIRA J.C. 1981. A origem do petróleo: Orgânica ou inorgânica? Spectrun - J. Bras. Cien., n.1, v.2, p.34-41, Julho/agosto 1981.

FISCHER M., KÖHNE R., SCHNURNBERGER W., TAMME R., 1995. Stationäre Chemische Energieumwandlung als Herausforderungen für den Uerfahresingenieur. Chemie Ingenieur Technik, v.67, n.10, p.1275-1287.

GOLDENBERG José, 1991. Conservação de Energia. Ciência Hoje, v.13, n.73, Junho 1991, p.49-54.

HÄFELE W., 1974. A Systems Approach to Energy. Americam Scientist, v.62, p.438-447, Julho-Agosto 1974.

HUBBERT M.K., 1971. The Energy Resources of The Earth. Scientific American, v.224, n.3, p.61-70, Setembro 1971.

IBGE. 1996. http://www.ibge.gov.br.

JONES Phil et al.,1996. 1995 The Warmest Year on Record (So Far). Climatic Research Unit, University of East Anglia. http://www.cru.uea.ac.uk/cru/press/pj9601/index.htm

KERR R.A., 1996. 1995 The Warmest Year? Yes and No. Science, v.271, n. 5246, 12/1/96.

KERR R.A. Science, v.271, n.5254, p.1360-1, 8/03/1996.

KJERFVE B. LACERDA L.D., 1992. Variação Relativa do Nível do Mar. Ciência Hoje, v.14, n.81, p.60-65, Maio 1992.

SCHINEIDER Stephen H., 1987. Climate Modeling. Scientific Americam, v.256, n.5, p.72-78,80,81, Maio 1987.

U.S. Energy Information Administration, 1995. Annual Energy Review. Statistical Abstract of the United States 1994, MedAccess Corp., http://www.medaccess.com/census/

OLADE. Energia en Chifras. Quito, Organización Latinoamericana de Energia, n.7, Julho 1995.

POULALLION Paul, 1990. Análise. Sem Emoção do Efeito Estufa. São Paulo Energia, v.7, n.64, p.32-36.

ROSENZWEIS Cynthia. PARRY Martim L., 1994. Potencial Impact of Climate Change on World Food Supply. Nature, v.367, n.6459, p.133-138, 13/01/94

WEC, 1993. World Energy Council, Energy for Tomorrows's World - The Realities, The Real Options and the Agenda for Achievements, St. Martin's Press, New York.

ABSTRACT

The limitedness of the Earth's natural resources is only recalled during the "Energy Crises". Mankind has been consuming exponentially, for the last two centuries, the Earth's energy resources. We have been taught to consider that this consumption is guaranteed to exist forever. What has taken millions of years to be formed is now being burnt at a rate which is millions of times higher than the forming rate. Soon demand should go beyond the offer and this lack should be compensated by the development of alternative sources of energy, together with the optimization of its use. This work presents an analysis of the world's energy consumption habits with respect to natural resources, renewable and not renewable, and also indicates the available solutions for the continuity of the development of mankind, based on what is known nowadays.

ABCM

ANÁLISE DE PARÂMETROS TERMODINÂMICOS DE DESEMPENHO E DE MÉTODOS DE ALOCAÇÃO DE CUSTOS EM SISTEMAS DE COGERAÇÃO EQUIPADOS COM TURBINAS DE CONTRAPRESSÃO

Arnaldo C. S. Walter, Jorge Llagostera, Waldyr L. R. Gallo
Departamento de Energia, Faculdade de Engenharia Mecânica
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Caixa Postal 6122 - CEP 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

Foi efetuada uma análise comparativa de alguns parâmetros de desempenho e de métodos de alocação de custos descritos na literatura. Tais parâmetros e critérios são baseados na Primeira e Segunda Leis da Termodinâmica - no caso dos parâmetros de desempenho - e sobre conceitos econômicos, energéticos e exergéticos - no caso dos métodos de alocação de custos. O estudo é aplicado a sistemas de cogeração equipados com turbinas a vapor de contrapressão, de grande aplicação em usinas de açúcar e álcool.

INTRODUÇÃO

O presente trabalho tem como objetivo analisar, de forma exploratória, a adequação de alguns parâmetros de desempenho de sistemas de cogeração enquanto indicadores de tendência dos custos de produção de seus produtos principais, i.e., potência e calor, bem como de tendência de eficiência econômica de todo o sistema.

A análise aqui apresentada foi feita tomando-se como referência uma configuração de sistema de cogeração usualmente encontrada em usinas de açúcar e álcool. Essa configuração corresponde a um sistema de cogeração com turbinas a vapor de contra-pressão, muito comum nas instalações industriais existentes no Brasil. No esquema apresentado na Figura 1, a turbina A representa o conjunto de turbinas que acionam dispositivos mecânicos diversos, tais como moendas, facas e desfibradores. Por sua vez, a turbina B representa as turbinas que fazem a geração de potência elétrica. O vapor de escape de ambas as turbinas é usado como vapor de processo, após a devida correção de sua temperatura de superaquecimento.

A operação do sistema foi simulada computacionalmente a partir da consideração de uma usina brasileira típica, inclusive com o emprego dos registros reais das demandas de vapor nos principais equipamentos térmicos dessa unidade industrial. Assim, pode-se considerar que os resultados obtidos refletem com boa aproximação as condições operacionais das usinas existentes no país.

Os resultados da simulação da operação em regime de carga variável - consideradas as funções de eficiência do conjunto de turbinas a vapor e geradores de vapor - foram então empregados tanto na análise de alguns parâmetros termodinâmicos de desempenho da instalação quanto na análise dos custos de produção de vapor e potência.

Do ponto de vista operacional, o comportamento das curvas dos parâmetros de desempenho e dos próprios custos é bastante influenciado pelas curvas de demanda de vapor de processo e das demandas de potência elétrica e mecânica.

Dada sua influência sobre a análise que se segue, é também importante destacar que a não coincidência das demandas de vapor nas linhas de alta e baixa pressão pode resultar em expansões de vapor por válvulas redutoras ou, ainda, na descarga de vapor de baixa pressão para a atmosfera. Na simulação efetuada foram considerados ambos os efeitos.

Para a configuração estudada considerou-se a geração de vapor a 2,2 MPa e 300°C. O estado do vapor enviado ao processo foi fixado para a pressão de 0,247 MPa e 137°C.

MODELAGEM

A análise termodinâmica foi efetuada por meio de um programa computacional desenvolvido para o estudo de ciclos de potência. As propriedades termodinâmicas da água foram determinadas por meio de subrotinas computacionais desenvolvidas anteriormente (Llagostera, 1994), com base nas correlações para a energia livre de Helmholtz estabelecidas por Keenan et al. (1978).

O programa computacional está composto por um conjunto de subrotinas modulares, associadas aos diversos tipos de componentes. Cada subrotina executa balanços de massa e energia para o respectivo volume de controle. O cálculo para o ciclo completo é efetuado seqüencialmente e iterativamente, com o objetivo de obter a convergência das grandezas que definem as condições de operação. Finalmente, o programa determina os fluxos de energia (entalpia) e de exergia em todos os pontos relevantes do ciclo, podendo servir como base para estudos termoeconômicos (Walter e Llagostera, 1995).

As características do combustível considerado neste estudo, ou seja, bagaço de cana com 50% de umidade (IPT, 1990), são apresentadas na Tabela 1. Todas as composições e teor de umidade apresentados referem-se a frações em massa. A temperatura de entrada da biomassa no volume de controle foi considerada igual a 25°C.

A exergia química do combustível foi determinada de acordo com Szargut et al. (1988), com base em correlação entre a exergia química e o poder calorífico inferior do combustível (PCI), considerando a relação entre as frações em massa de oxigênio e carbono, a composição elementar do combustível, e o conteúdo de cinza e de umidade. A exergia química calculada para o bagaço de cana com 50% de umidade foi 9.917 kJ/kg (referida a 25°C e 101,325 kPa).

Neste trabalho foram adotados os critérios apresentados por Moran e Sciubba (1994) para a definição de exergia física e de exergia química. Tanto para os fluxos de exergia como para os de entalpia foi adotado como estado de referência o definido pela temperatura de 25°C e pressão de 101,325 kPa.

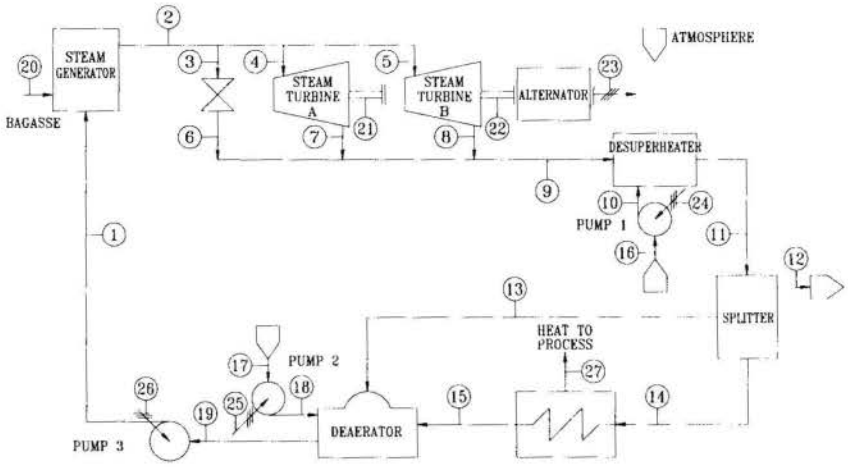


Figura 1 - Fluxograma esquemático do sistema de cogeração estudado.

Tabela 1: Caracterização do combustível.

Características do Combustível	
Tipo	bagaço de cana
Umidade	0,50
PCI (MJ/kg)	7,53
Exergia Química (kJ/kg)	9.917
Composição Elementar(Base Seca)	
Carbono	0,463
Hidrogênio	0,064
Oxigênio	0,433
Enxofre	0,001
Nitrogênio	-------
Cinza	0,040

Para a simulação operacional foi considerada uma instalação com capacidade de moagem de 7.200 toneladas de cana por dia. A capacidade nominal total do conjunto de geradores de vapor foi fixada em 160 toneladas de vapor por hora. A eficiência do sistema de geração de vapor, referida ao PCI do combustível, foi caracterizada por uma função polinomial da geração de vapor, com valor máximo igual a 80% para a geração nominal. Para as turbinas de contra-pressão utilizadas para o acionamento de geradores elétricos, a eficiência isentrópica foi representada por meio de uma função polinomial da vazão de vapor, com valor máximo 66%. A eficiência mecânica foi fixada em 97% e a eficiência do gerador elétrico em 98%.

Para as turbinas de contra-pressão utilizadas para o acionamento dos sistemas de moagem, a eficiência foi também representada por uma função polinomial da vazão de vapor, com valor máximo 43%, sendo que a eficiência mecânica também foi fixada em 97%. Para todas as bombas a eficiência isentrópica foi fixada em 70%, com eficiências de conversão mecânica e elétrica de 97% e 98%, respectivamente.

Os parâmetros acima descritos correspondem a valores típicos do setor sucro-alcooleiro.

ANÁLISE TERMODINÂMICA

A avaliação de desempenho de uma planta de cogeração não é um procedimento elementar dada a própria dificuldade de determinação de uma medida de eficiência global em uma unidade onde os produtos principais - calor e potência - têm diferente valor termodinâmico.

Entre os parâmetros normalmente empregados para a análise de desempenho de sistemas de cogeração, três foram escolhidos para serem quantificados e analisados quanto à operação do sistema de cogeração anteriormente descrito. São eles: (i) a Eficiência de Primeira Lei, (ii) a Eficiência de Segunda Lei e (iii) a Eficiência Racional de geração de potência. As relações que caracterizam esses parâmetros são apresentadas a seguir.

A *eficiência energética*, ou *eficiência de Primeira Lei* (η_I), é um indicador baseado no princípio físico da conservação de energia. Face à restrições para interpretar esse indicador como uma medida de eficiência, alguns autores preferem chamá-lo de "Fator de Utilização de Energia". No presente trabalho, a relação empregada para a sua avaliação, considerada toda a planta, é a seguinte:

$$\eta_I = \frac{(\dot{W}_{el} + \dot{W}_m + \dot{Q}_p)}{\dot{m}_c \; PCI + \dot{H}_e} \tag{1}$$

onde

$\dot{W}_{el}$ = potência elétrica produzida [kW];

$\dot{W}_m$ = potência mecânica produzida [kW];

$\dot{Q}_p$ = calor de processo [kJ/s];

$\dot{m}_c$ = fluxo mássico de combustível [kg/s];

PCI = poder calorífico inferior do bagaço [kJ/kg];

$\dot{H}_e$ = fluxo de energia associado à água de reposição [kJ/s].

A potência mecânica apresentada na Eq. (1) refere-se à parcela da potência mecânica produzida nas turbinas de acionamento das moendas. O calor de processo indicado nessa mesma expressão corresponde à diferença entre o fluxos de entalpia do vapor enviado ao processo industrial e o fluxo de entalpia do condensado, que é devolvido pelo processo ao sistema estudado.

A principal restrição a esse parâmetro enquanto indicador de desempenho está na não diferenciação entre a potência e o calor, já que ambos são formas energéticas de valor distinto. Alguns autores também destacam que, no caso da redução da potência gerada com aumento simultâneo da produção de calor de processo, a eficiência de primeira lei tende a aumentar já que as

perdas mecânicas e as perdas do gerador elétrico são reduzidas. Em um caso extremo, quando não houvesse produção de potência, a eficiência seria máxima.

A eficiência global de uma instalação de produção combinada de calor e potência pode também ser avaliada em função do balanço dos fluxos de exergia do sistema. Kotas (1980) destaca que o uso de uma forma de eficiência baseada no conceito de exergia é particularmente vantajosa no caso de uma planta de cogeração. Para os sistemas analisados, a *eficiência exergética*, ou *eficiência de Segunda Lei* (η_{II}), pode ser calculada pela relação:

$$\eta_{II} = \frac{(\dot{W}_{el} + \dot{W}_m + \dot{E}_p)}{\dot{m}_c\, e_c + \dot{E}_e} \qquad (2)$$

onde

$\dot{E}_p$ = fluxo de exergia associado ao calor de processo [kJ/s];

e_c = exergia específica do combustível [kJ/kg];

$\dot{E}_e$ = fluxo de exergia associado à água de reposição [kJ/s].

O fluxo de exergia associado ao calor de processo corresponde, neste estudo, à diferença entre o fluxo de exergia relativo ao vapor enviado ao processo e o fluxo de exergia do condensado retornado ao sistema. Observe-se que a exergia correspondente aos gases de combustão à saída das caldeiras, ou do vapor lançado em algumas situações à atmosfera, é contabilizada como sendo destruída completamente no interior do volume de controle, sendo então computadas como irreversibilidades internas ao mesmo. O fluxo de exergia associado à água de reposição é nulo no âmbito do presente estudo, já que foi adotada a hipótese de que o estado da água de reposição corresponde ao estado de referência. A exergia do ar ambiente também foi considerada nula.

Já a *eficiência racional* é um parâmetro que se encaixa na classe das relações entre desempenhos reais e ideais. Quantitativamente, é uma relação entre o trabalho real produzido por uma instalação e o trabalho ideal máximo que poderia ter sido produzido pela mesma, nas mesmas condições de entrada e saída do fluido de trabalho. Embora possa ser bastante útil na análise de instalações exclusivamente de potência, seu emprego, no entanto, pode ser questionado no caso das instalações de cogeração exatamente por não considerar o calor de processo enquanto produto.

Neste trabalho foi empregada a definição de eficiência racional de geração de potência apresentada por Kotas (1985), segundo a qual:

$$\phi = \frac{(\dot{W}_{el} + \dot{W}_m)}{\Delta \dot{E}_v} \qquad (3)$$

onde $\Delta \dot{E}_v$ é a variação do fluxo de exergia associado ao vapor no ciclo termodinâmico - entre o estado 2 (ver Figura 1), em que o vapor é gerado, e imediatamente antes do envio do vapor ao processo (estado 14, de acordo com a mesma figura).

Parâmetros de Desempenho em Regime de Carga Variável. A Figura 2 apresenta a variação da eficiência de Primeira Lei, de Segunda Lei e da eficiência racional em função dos desequilíbrios entre as linhas de alta e baixa pressão da instalação de cogeração objeto de estudo. Valores negativos no eixo das abscissas correspondem a fluxos mássicos pela válvula redutora de pressão, enquanto valores positivos representam descargas de vapor para a atmosfera.

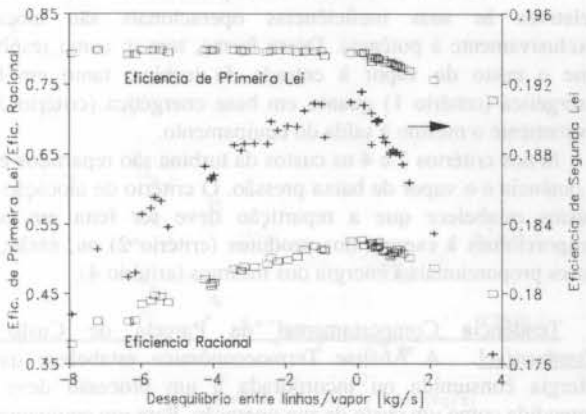


Figura 2 - Parâmetros de desempenho em função do desequilíbrio entre as linhas de vapor.

Cabe notar que o perfil das três curvas é influenciado pelas curvas de eficiência do gerador de vapor e das turbinas. Para a eficiência de Primeira Lei prevalece o efeito da curva do gerador de vapor, enquanto que para a eficiência racional são determinantes as curvas de eficiência da turbina.

A eficiência de Segunda Lei e a eficiência racional mostram um comportamento mais simétrico em relação à linha de centro. Deve-se notar que o ponto de máximo, para um dado valor de geração de vapor, pode ser deslocado tanto à direita quanto à esquerda dependendo da correspondência entre o fluxo nominal de vapor pela turbina e o desequilíbrio entre as linhas de alta e baixa pressão.

ANÁLISE TERMOECONÔMICA

Custos de Produção de Vapor e Potência. Os custos de produção do vapor e das potências que acionam as moendas e o gerador elétrico foram calculados a partir da aplicação da Termoeconomia ao sistema em estudo. Dessa forma, no presente trabalho só foram explorados critérios de alocação de custos que têm fundamentação termodinâmica (Reistad e Gaggioli, 1980). Todos os valores adotados para custos de capital, combustível e manutenção refletem custos típicos no mercado brasileiro (Walter, 1994).

A Análise Termoeconômica permite a identificação das perdas e irreversibilidades nos vários componentes de um sistema térmico, bem como a quantificação, em termos monetários, dos efeitos dessas ineficiências sobre os custos (Valero et al., 1994). De acordo com a metodologia original, os fluxos de exergia no sistema determinam a repercussão dos custos dos produtos de um equipamento sobre os demais componentes da instalação. Uma variante do procedimento também foi aplicada neste trabalho, com o uso dos fluxos energéticos na quantificação dos custos.

Diz-se que há uma "bifurcação" quando um equipamento produz mais de um produto, como, por exemplo, dois fluxos de vapor à saída ou, ainda, um fluxo de vapor e outro de potência. Nesses casos, a aplicação da metodologia requer a definição de um procedimento de repartição dos custos do equipamento entre os produtos - tanto o custo relativo às suas ineficiências operacionais quanto ao seu próprio custo de capital. Quatro procedimentos distintos foram aplicados ao sistema em estudo, sendo que em dois deles - os critérios 1 e 2 - a base de alocação é a exergia dos produtos, enquanto nos outros dois - critérios 3 e 4 - a base de alocação é a energia. Como só as turbinas apresentam produtos de valor termodinâmico distinto - vapor e potência - a diferenciação entre os quatro critérios é mais importante nesse componente.

Nos critérios 1 e 3, o custo de capital da turbina e os custos relativos às suas ineficiências operacionais são alocados exclusivamente à potência. Dessa forma, tem-se como resultado que o custo do vapor à entrada da turbina, tanto em base exergética (critério 1) quanto em base energética (critério 3), é exatamente o mesmo à saída do equipamento.

Já nos critérios 2 e 4 os custos da turbina são repartidos entre a potência e o vapor de baixa pressão. O critério de alocação dos custos estabelece que a repartição deve ser feita em bases proporcionais à exergia dos produtos (critério 2) ou, então, em bases proporcionais à energia dos mesmos (critério 4).

Tendência Comportamental da Parcela de Custo de Combustível. A Análise Termoeconômica estabelece que a exergia consumida ou incorporada a um processo deve ser entendida como um custo de sua operação. Para um equipamento, ou para todo o sistema, os custos exergéticos indicam exatamente quantas vezes a unidade de exergia de um fluxo é mais "cara" do que a unidade de exergia do insumo que alimenta todo o processo. Para os casos em estudo, a avaliação dos custos exergéticos do vapor de processo e das potências indica quantas vezes a unidade de exergia desses produtos é mais cara do que a unidade de exergia do bagaço.

O custo exergético dos produtos de um equipamento está associado à eficiência operacional, em base exergética, desse equipamento. Analogamente, no caso de um sistema térmico, o custo exergético de seus produtos está associado à cadeia de eficiências dos vários equipamentos existentes. O mesmo raciocínio pode ser aplicado aos "custos energéticos", quando do uso de um critério de alocação de custos baseado nos fluxos de energia do sistema. Dessa forma, a perfeita interpretação da parcela de custo de combustível requer a identificação de todas as ineficiências que resultam em perdas de energia ou destruições de exergia.

Qualquer um dos quatro critérios de alocação adotados dá à parcela de custo de combustível, tanto do vapor quanto das potências, uma tendência comportamental muito similar, tendência essa que é bastante influenciada pelo desequilíbrio entre as linhas de vapor de alta e baixa pressão.

Na Figura 3, que ilustra a tendência observada para o critério de alocação 3, nota-se que os custos variam de forma mais pronunciada na medida em que crescem as descargas de vapor para a atmosfera, mantendo um comportamento pouco variável quando vapor é expandido pela válvula redutora. As perdas resultantes da descarga de vapor para a atmosfera afetam em maior medida ao vapor de processo, com uma repercussão

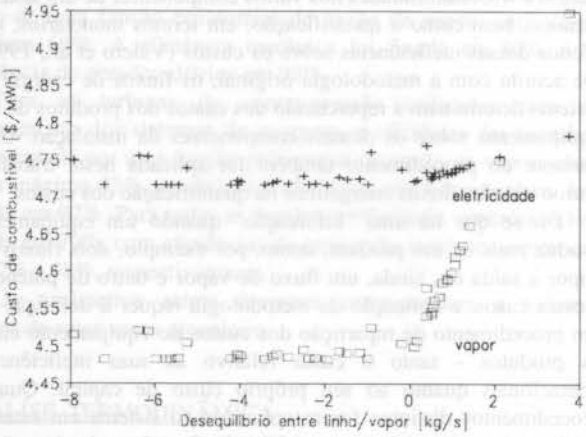


Figura 3 - Parcela de custo de combustível do vapor e da energia elétrica para o critério 3.

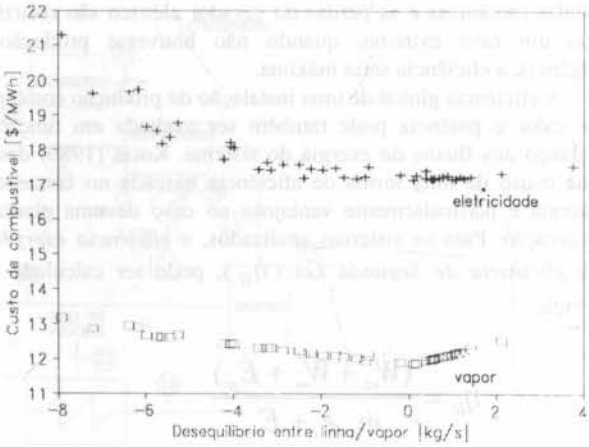


Figura 4 - Parcela de custo de combustível da energia elétrica e do vapor, para o critério 1.

menor sobre as potências. Para um mesmo valor de desequilíbrio, a dispersão notada deve-se ao regime operacional do gerador de vapor, já que quanto mais a operação fugir do ponto nominal, maiores serão as ineficiências do processo. Na região de desequilíbrios negativos, o custo da unidade de energia do vapor de processo guarda uma relação constante com o custo da potência elétrica, relação esta que corresponde exatamente ao valor das eficiências de acoplamento mecânico e do gerador elétrico. A mesma tendência é observada para os resultados da aplicação do critério 4.

Na Figura 4 é apresentada a evolução dos custos do vapor de processo e da potência elétrica, segundo o critério 1. A diferenciação em relação aos resultados apresentados na Figura 3 deve-se, por um lado, aos efeitos das irreversibilidades associadas à expansão de vapor pela válvula redutora e, por outro, à eficiência de operação das próprias turbinas. A função empregada para expressar a eficiência isoentrópica da turbina determina a tendência de arredondamento da curva de custos da eletricidade em relação aos resultados verificados para o vapor. Para um mesmo valor de desequilíbrio, a dispersão observada deve-se à influência dos diferentes regimes de operação do gerador de vapor. Tendência similar é observada para os resultados do critério de alocação 2.

Tendência Comportamental dos Custos Totais. A Análise Termoeconômica também permite o cálculo dos custos totais de produção do vapor de processo e das potências, ou seja, seus "custos exergoeconômicos", de acordo com a denominação usual. No presente trabalho, para a avaliação dos custos totais foram consideradas as seguintes parcelas: (i) parcela de custo de combustível, que é calculada conforme discutido anteriormente, (ii) parcela de custo de capital e de custo de manutenção, sendo que este último foi avaliado como uma porcentagem do custo de capital e (iii) parcela de custo da água de reposição e da água usada para o dessuperaquecimento do vapor.

Os custos totais, inclusive os custos de capital e de manutenção de cada componente, se distribuem entre os fluxos da instalação da mesma maneira como ocorre a repercussão do custo do combustível, i.e., em função da intensidade das correntes, em termos energéticos ou exergéticos, e em função dos critérios de repartição de custos em cada bifurcação.

A tendência comportamental dos custos totais depende, em primeira instância da relação entre as parcelas de custo de combustível e de custo de capital. Nesta análise estamos desprezando o efeito da água de reposição, parcela que é pequena em relação às demais. Para um dado produto e um dado critério

de alocação, quando a parcela de combustível é determinante a tendência dos custos totais é bastante influenciada pelo desequilíbrio entre as linhas de vapor. Por outro lado, quando a parcela de capital é que é preponderante, a evolução dos custos totais pode apresentar um correlação mais adequada com algum outro parâmetro operacional.

Assim, por exemplo, como a geração de potência elétrica apresenta um bom ajuste com o desequilíbrio, é o desequilíbrio que melhor indica a tendência de evolução de seus custos totais. Já no caso da potência mecânica, é a geração de vapor que indica a melhor tendência tanto para a parcela de custo de capital quanto para os custos totais. A parcela de capital será tanto maior quanto menor for a produção de um dado produto. Os resultados obtidos para os custos totais da energia elétrica e da potência mecânica, segundo os critérios 1 e 2, são apresentados nas Figuras 5 e 6, respectivamente.

Para o vapor de processo, os resultados obtidos são muito similares aos observados para a energia elétrica. Não são verificadas grandes variações entre os quatro critérios de alocação.

Custos Médios Segundo os Vários Critérios. A escolha de um critério de alocação de custos para um sistema de cogeração pode ter grande influência na valorização de cada um dos produtos. Estudos anteriores já ressaltaram o fato de que a aplicação, em sistemas de cogeração, de critérios de alocação baseados na exergia tendem a valorizar a potência em detrimento do vapor, ocorrendo o oposto quando da adoção de critérios baseados na energia dos produtos.

Além da evidência desse fato, os resultados da Tabela 2 chamam a atenção para a grande variação observada nos valores de um dado produto em função do critério de alocação adotado, variação essa que chega a ser da ordem de seis vezes para o estudo em questão no caso da potência que aciona as moendas.

É igualmente importante destacar que os custos de um dado produto apresentam maior ou menor dispersão em torno de seu valor médio dependendo do critério de alocação. Tal fato pode ser observado na Tabela 2 através da comparação entre os custos médios e seus respectivos desvios-padrão, para cada produto e para cada critério de alocação.

RELAÇÃO ENTRE PARÂMETROS DE DESEMPENHO E EFICIÊNCIA ECONÔMICA

Nas figuras anteriormente apresentadas pode-se notar a existência de uma certa relação entre parâmetros de desempenho - basicamente a eficiência racional - e os custos dos produtos de sistemas de cogeração. Da mesma forma, no estudo feito verificou-se que um certo grau de correlação também pode ser estabelecido entre os parâmetros de desempenho e a rentabilidade do empreendimento, i.e., a diferença entre a receita e os custos. A rentabilidade foi aqui empregada como um indicador de eficiência econômica, dado que o valor de comercialização dos produtos afeta sobremaneira a viabilidade da instalação.

A associação entre rentabilidade e parâmetros de desempenho ou operacionais varia com as considerações feitas quanto à receita dos três produtos. Para os dois casos ilustrados nas figuras 7 e 8, a título de ilustração, pode-se observar uma boa associação entre a rentabilidade e a eficiência racional e entre a rentabilidade e a eficiência de primeira lei, respectivamente. Por outro lado, para outras hipóteses levantadas no estudo, outras associações mostraram-se mais adequadas.

Eventualmente, um certo parâmetro de desempenho do sistema poderia ser empregado em um procedimento de otimização de sua eficiência econômica, desde que essa fosse expressa, cabe ressaltar, pela rentabilidade da instalação. No

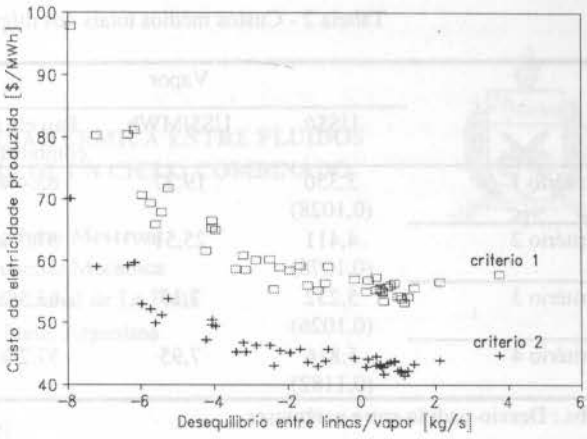


Figura 5 - Custos totais da energia elétrica produzida, segundo os critérios 1 e 2

entanto, tal hipótese só seria possível se fosse conhecida, a priori, qual a relação existente entre esses parâmetros, isto é, qual o parâmetro de desempenho que melhor se correlaciona com a rentabilidade do empreendimento. O problema é que essas correlações variam bastante na medida em que diferentes relações de preços são consideradas para os vários produtos.

CONCLUSÕES

Parâmetros de desempenho de sistemas de cogeração, tais como os analisados neste trabalho, não são necessariamente bons indicadores de tendência de custos de produção de todos seus produtos. Para o estudo feito, a melhor correlação foi verificada entre a eficiência racional e os custos de energia elétrica e vapor.

Da mesma forma, a boa correlação observada entre alguns parâmetros de desempenho e a rentabilidade do sistema não pode ser extensivamente usada, como por exemplo em um procedimento de otimização, face à grande variabilidade observada entre os resultados do estudo.

Finalmente, cabe observar que como os critérios de alocação de custos não afetam diretamente a rentabilidade, a metodologia preconizada pela Termoeconomia não conduz, por si só, à otimização da eficiência econômica. No entanto, os critérios de alocação com base exergética indicam com mais clareza do que

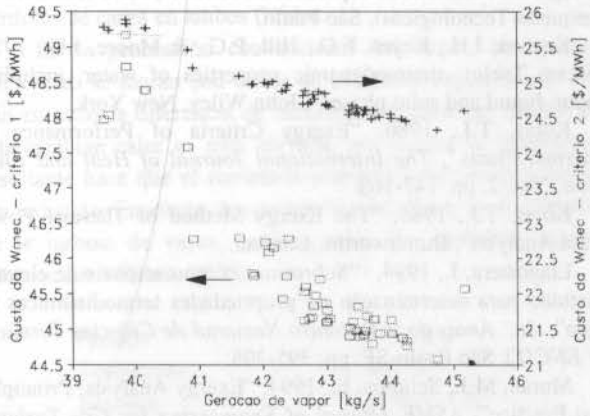


Figura 6 - Custos totais da potência mecânica produzida, segundo os critérios 1 e 2

Tabela 2 - Custos médios totais dos diferentes produtos segundo vários critérios de alocação

	Vapor			$\dot{W}_m$		$\dot{W}_{el}$	
	US$/t	US$/MWh	Parcela de combustível	US$/MWh	Parcela de combustível	US$/MWh	Parcela de combustível
Critério 1	3,350 (0,1028)	19,37	63,4%	45,70 (1,090)	52,4%	60,77 (8,900)	29,1%
Critério 2	4,411 (0,1078)	25,51	57,3%	24,84 (0,389)	58,8%	46,58 (5,705)	29,8%
Critério 3	5,232 (0,1026)	7,15	63,5%	15,37 (0,559)	30,2%	40,38 (7,466)	11,7%
Critério 4	5,816 (0,1182)	7,95	57,2%	7,68 (0,112)	58,7%	29,49 (4,947)	15,6%

Obs.: Desvio-padrão entre parênteses

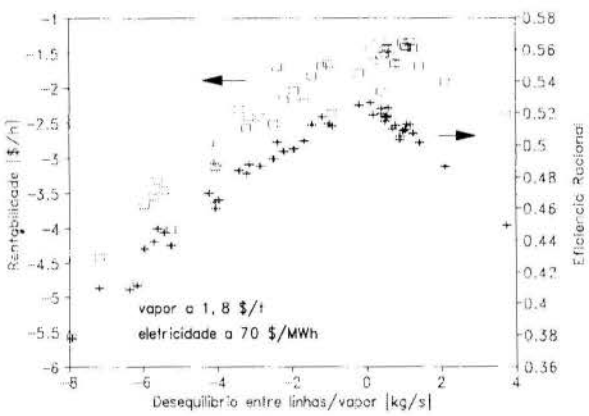


Figura 7 - Relação entre rentabilidade e eficiência racional

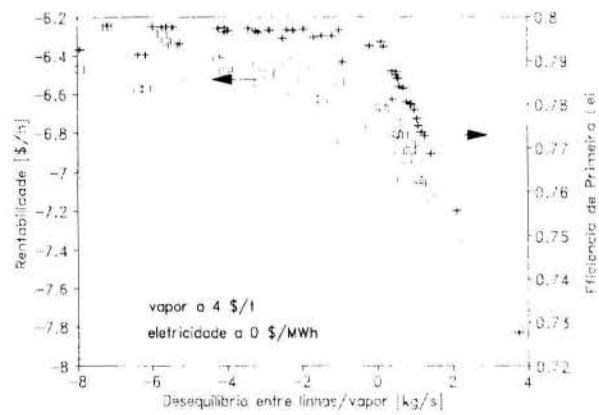


Figura 8 - Relação entre rentabilidade/eficiência de Primeira Lei

os critérios que têm base na energia a influência dos processos de conversão sobre a formação dos custos. Os critérios 1 e 2 igualmente permitiram a valorizaçao das potências em detrimento do calor de processo, confirmando o que tem sido bastante discutido na literatura.

Essas conclusões podem ser estendidas a outros sistemas de cogeração com características de operação similares.

REFERÊNCIAS

IPT, 1990, "Manual de Recomendações - Conservação de Energia na Indústria do Açúcar e do Álcool", IPT (Instituto de Pesquisas Tecnológicas), São Paulo.

Keenan, J.H., Keyes, F.G., Hill, P.G., & Moore, J.G., 1978, "Steam Tables: thermodynamic properties of water, including vapor, liquid and solid phases", John Wiley, New York.

Kotas, T.J., 1980, "Exergy Criteria of Performance of Thermal Plants", *The International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 2, pp. 147-163.

Kotas, T.J., 1985, "The Exergy Method of Thermal Power Plant Analysis", Butterworths, London.

Llagostera, J., 1994, "Subrotinas computacionais de elevada exatidão para determinação de propriedades termodinâmicas da água", In: *Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas (V ENCIT)*, São Paulo-SP, pp. 395-398.

Moran, M.J., Sciubba, E., 1994, "Exergy Analysis: Principles and Practice", *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 116, pp. 285-290.Reistad, G.M., Gaggioli, R.A., 1980, "Available-Energy Costing", In: *Thermodynamics: Second Law Analysis, ACS Symposium Series 122*, ACS, Washington.

Szargut, J., Morris, D.R., and Steward, F.R., 1988, "Exergy Analysis of Thermal, Chemical and Metallurgical Processes", Hemisphere, New York.

Valero, A., Lozano, M.A., Serra, L., and Torres, C., 1994, "Application of the exergetic cost theory to the CGAM problem", *Energy (Oxford)*, Vol. 19, N. 3, pp. 365-381.

Walter, A.C.S., "Impactos e Perspectivas da Cogeração e da Geração Termoelétrica Junto ao Setor Sucro-Alcooleiro". Tese de Doutorado, PSE-FEM-Unicamp, Campinas, 1994.

Walter, A.C.S., Llagostera, J., 1995, "Exergetic and Thermoeconomic Analysis of Biomass Integrated Gasifier/Gas Turbine Power Cycles", In: *Proceedings of the 1995 ASME Cogen-Turbo Power Conference*, August 23-25, Vienna, Austria, paper ASME 95-CTP-14, 9 p.

ABSTRACT

The issue of this paper is the comparative analysis of some performance parameters and some available cost allocation methods, both well described in the literature. Those parameters and criteria are based on the First and Second Laws of Thermodynamics - in the case of performance parameters - and on economic concepts as well as on energetic and exergetic concepts - in the case of cost allocation methods. The study is applied to steam turbine cogeneration systems, assuming a typical worldwide sugar alcohol sugar-cane mill. In these systems, electric power, mechanical power and steam to the industrial process are produced.

ABCM

LA INCIDENCIA DE LA TRANSFERENCIA TÉRMICA ENTRE FLUIDOS INTERMEDIARIOS EN LA EFICIENCIA DE UN CICLO COMBINADO

Ing Alberto Fushimi. Ing. Julio Mestroni
Área Termotecnia. Departamento Mecánica
Facultad de Ingeniería. Univ. Nacional de La Plata
Av. 1 Esq. 47.- (1900) La Plata, Argentina

RESUMEN

La eficiencia de un ciclo combinado depende no solo de la eficiencia de sus ciclos de topping y de bottoming, sino también de la transferencia de calor entre los correspondientes fluidos intermediarios en el HRSG, lo que debe realizarse maximizando la recuperación y minimizando la generación de entropía en el proceso, lo que implica interactuar con los parámetros de ambos ciclos, para cada esquema conceptual considerado. En el presente trabajo, se intenta poner a consideración de la Comunidad Académica, los resultados y conclusiones de los trabajos realizados al respecto por la Unidad de Investigación y Desarrollo (UID) del Departamento Mecánica de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata

INTRODUCCIÓN

El incremento continuo de la eficiencia de las centrales termoeléctricas que ha registrado la historia, muestra el camino de los esfuerzos en la dirección de la minimización de la generación de entropía en las plantas motrices, y puede ser considerado como un subproducto de un esfuerzo de mayor interés práctico: el de obtener mayores potencias para satisfacer una demanda fuertemente creciente, en un contexto limitado por cuestiones económicas. [Bejan, 1988]

En este marco, la aceptación mundial de los ciclos combinados para la generación de energía eléctrica, basados en la combinación de turbinas a gas (TG o unidad de Topping), HRSG (Heat Recovery Steam Generator) y turbinas de vapor (TV o unidad de Bottoming), es el resultado del alto rendimiento térmico, bajo costo de instalación, elevada confiabilidad, bajo impacto ambiental, y flexibilidad de operación, obtenidos con dichas unidades trabajando en forma conjunta.

El ciclo combinado abarca principalmente tres tecnologías básicas, las que corresponden a la TV, al HRSG y a la TG. La primera de éstas, podemos decir que constituye una tecnología madura, mientras que la segunda, correspondiente al HRSG, depende íntimamente de las limitaciones del ciclo de bottoming y de la evolución de los turbogrupos a gas.

El aumento de la temperatura de los gases en las turbinas de gas, ha sido el desarrollo más importante en los últimos 30 años, incrementando su valor desde 815 °C en los 60's, hasta valores próximos a 1300 °C en la actualidad, posibilitado por la evolución tecnológica de los materiales componentes y de los sistemas de refrigeración interna de los álabeS, [D. E. Brandt y R. R. Wesorick, 1992]. Esto permitió mejorar la eficiencia de dichas unidades y, al mismo tiempo, aumentar la temperatura de los gases en el escape, favoreciendo la recuperación de la energía térmica en el HRSG y elevando rendimiento neto de los ciclos combinados hasta valores próximos al 55%.

En el presente trabajo, se tratará la problemática de la transferencia de energía térmica entre los fluidos intermediarios de un ciclo combinado, más precisamente, la maximización de la eficiencia del ciclo mediante la reducción de la generación de entropía en dichos procesos, originada como consecuencia de una adecuada selección de los parámetros del vapor en el ciclo de bottoming.

En un HRSG, los fluidos que intercambian calor son:

Fluido caliente: gases de combustión, que entrega calor sensible, según una correlación entalpía - temperatura compleja.

Fluido frío: agua, que para presiones subcríticas constituye un receptor de calor sensible y latente, en uno o mas escalones según el número de presiones definido para el ciclo.

Existen pues razones físicas que hacen que la transferencia térmica inevitablemente se realice con diferentes grados de irreversibilidad, además de las económicas que imponen limitaciones en la magnitud de las superficies de intercambio y las pérdidas de carga en ambos fluidos.

En la generación convencional del vapor, las mayores eficiencias se logran con ciclos de presiones supercríticas, pero aún en éstos la diferencia de temperaturas entre los fluidos que intercambian calor es muy elevada, por lo que la degradación resultante hace que el contenido exergético del vapor generado sea reducido. En efecto, los parámetros del fluido en la admisión de la turbina de vapor, pueden tener los siguientes valores: [Babcock & Wilcox, 1972]

Presión	275 Bara
Temperatura	593 °C
Entalpía	3446 kJ / kg
Entropía	6.1052 kJ / kg K
Anergía, To=40°C	1911.8 kJ / kg
Exergía	1534.2 kJ / kg
% Exergía	44.52 %

Este último indicador, da una idea preliminar (antes de considerar la regeneración), de la magnitud de la máxima eficiencia ideal lograble con este tipo de ciclos, y es indicativo de la notable degradación que produce una caldera convencional.

Puesto que un HRSG dispone de gases cuyo contenido exergético es del orden del 40 ~ 45% con relación a su entalpía dependiendo de su temperatura, el margen disponible para producir vapor cuyo contenido exergético debe ser próximo al 40% es escaso, y constituye un interesante desafío a la creatividad.

CONFIGURACIONES A CONSIDERAR

En el presente trabajo, se pretende hacer una reseña de las posibilidades de reducir la generación de entropía del conjunto HRSG + TV en sus diferentes configuraciones, partiendo desde la mas simple, y teniendo en cuenta las interacciones que existen entre estas unidades. Para lograr ésto y mostrar sus resultados de un modo comparativamente válido, se consideró el gas de una TG con la temperatura de escape y la composición constantes.

Debido a que los turbogrupos de gas son lanzados al mercado después de una etapa exhaustiva de investigación, desarrollo y experimentación por parte del fabricante, estas unidades no se construyen según especificaciones del usuario, sino que deben ser seleccionadas de entre las existentes en plaza siendo este el punto inicial del diseño del ciclo combinado.

Consecuentemente, en el desarrollo del estudio, se ha considerado una turbina a gas tipo *heavy duty*, de última generación con las siguientes prestaciones en condiciones ISO:

Modelo	PG 9331 FA
Potencia	226.5 MW
Eficiencia neta	35.67 %
Temp. escape	589.5 °C
Flujo másico	614.5 kg/s

El diseño del HRSG parte pues del caudal y temperatura de los gases de escape de la turbina, cuyos valores determinan la temperatura máxima a la que se pude llegar en el vapor sobrecalentado, y el caudal de vapor producible. Estas restricciones se definen mediante el diferencial mínimo de temperaturas en el sobrecalentador, y del pinch y approach points cuyos valores deben ser tales que la transferencia térmica sea posible con superficies razonables. En los estudios a los que se hace referencia en el presente trabajo, se adoptó una temperatura máxima del vapor de 540 °C, y un pinch y approach points de 8 °C en todos los casos.

El HRSG ha sido evaluado según dos criterios energéticos diferentes que se complementan para determinar los resultados finales de la optimización:

a) Primer Principio de la Termodinámica: el balance entálpico para cada uno de los paquetes componentes del HRSG (economizadores, vaporizadores y sobrecalentadores), permite determinar los parámetros de entrada y de salida de cada uno de éstos, tanto del lado [agua-vapor de agua] como del lado [gases calientes]. Con la integración de dichos balances se obtienen los valores que permiten cuantificar y cualificar el comportamiento térmico global del HRSG.

En algunas configuraciones es posible llevar la transferencia entálpica a niveles tales que la temperatura de los gases en la chimenea de la caldera de recuperación sea inferior a ~100 °C, en cuyo caso existirá condensación de humedad sobre las superficies de intercambio de menor temperatura, por lo que, en caso de combustibles con contenido de azufre u otros contaminantes, se deberán utilizar materiales resistentes a la corrosión en el economizador o precalentador de baja presión.

b) Segundo Principio de la Termodinámica: este método de análisis se basa en la determinación de las irreversibilidades en el proceso de transferencia térmica. Esto permite la localización de las zonas críticas, o que ofrecen posiblidades de mejoras considerables, y la selección de los parametros que conducen a la minimización de la creación de entropía en el HRSG, la que puede ser cuantificada con la siguiente ecuación diferencial:

$$dS = (1/Tv - 1/Tg).dQ \qquad (1)$$

en la que siendo: (con arreglo en caso de calor latente)

$$dQ = Cpv \,.\, dTv = Cpg \,.\, dTg$$

resulta:

$$dS = Cpv \,.\, dTv/Tv - Cpg \,.\, dTg/Tg \qquad (2)$$

donde:

S : creación de entropía.
Q: calor transferido.
Cpv: capacidad calorífica del agua - vapor
Cpg: capacidad calorífica de los gases
Tv : temperatura lado agua-vapor.
Tg : temperatura lado gases.

la Ecuación (2) puede ser integrada si se conocen las correlaciones V(Cpv, Tv) = 0 , G(Cpg, Tg) = 0 en procesos a presión constante, y calculada numéricamente con los valores de las temperaturas extremas en el intervalo considerado. También es posible transformar la Ecuación diferencial (1) a diferencias finitas con intervalos ΔQ suficientemente chicos, lo que es facilitado por la utilización de medios computacionales.

La expresión (1) muestra que la creación de entropía (irreversibilidad del proceso) se incrementa al aumentar la diferencia de temperaturas entre los fluidos que intercambian calor. En consecuencia, para maximizar la transferencia exergética que ocurre en el HRSG será necesario disminuir dicha diferencia lo que es observable gráficamente por la aproximación de la curva de calentamiento agua-vapor a la de enfriamiento de los gases, y lograble, dentro de ciertos límites, con una adecuada selección de las presiones y temperaturas de la generación del vapor.

La selección de los parámetros de la turbina de vapor, deberá hacerse con el fin de conseguir la mayor potencia erogable en el ciclo de bottoming, pero no podrán ser ajenos a las limitaciones que impone el conjunto HRSG+TV, como ser, la temperatura del vapor vivo y las condiciones de condensación, debido a la necesidad de conservar la humedad del vapor al final de la expansión dentro del rango de valores admisibles.

Los análisis realizados, incluyeron las tres configuraciones del ciclo de bottoming, en orden creciente de complejidad, todas ellas con HRSG's sin fuego suplementario:

- Ciclo de bottoming de 1 presion.
- Ciclo de bottoming de 2 presiones.
- Ciclo de bottoming de 3 presiones con recalentamiento.

Para efectuar estos estudios, se han confeccionado tres programas en planillas de cálculo (spreadsheets), uno para cada configuración, los que determinan los parámetros, magnitudes y cualidades de interés.

En cada una de estas alternativas, se determinó la influencia de la selección de las presiones y temperaturas de generación de vapor, sobre la creación de entropía en el HRSG y su impacto en la eficiencia neta del ciclo combinado.

CICLO COMBINADO CON BOTTOMING DE 1 PRESIÓN

En la Figura 1 se muestra el perfil de temperaturas del HRSG para una presión del vapor de 40 Bara, con 5 paquetes de transferencia térmica:

Sobrecalentador de AP
Vaporizador de AP
Economizador de AP
Vaporizador de BP
Precalentador de BP.

utilizándose el vapor saturado de BP solo para el calentamiento del agua en el desaireador, lo que eventualmente puede admitir otras soluciones.

Al variar la presión del vapor, la característica de la curva de los gases no cambia, por lo que el punto final del enfriamiento indica, salvo pérdidas, el flujo entálpico total entregado al agua, y su temperatura de salida a chimenea. Resulta pues intuitivo que, al aumentar la temperatura de vaporización por efecto de un aumento de presión, el HRSG a pinch constante, tenderá a reducir el caudal de producción de vapor, lo que se cumple para presiones de hasta unas 100 Bara, por encima del cual el caudal aumenta levemente. Este efecto es mas pronunciado cuanto mayor es la temperatura de entrada de los gases al HRSG, pero en general no puede ser utilizado debido a la limitación de la humedad del vapor al final de la expansión en la turbina, cuando ésta tiene un rendimiento isoentrópico elevado y una baja temperatura de condensación, ambos factores favorables para la eficiencia del ciclo combinado.

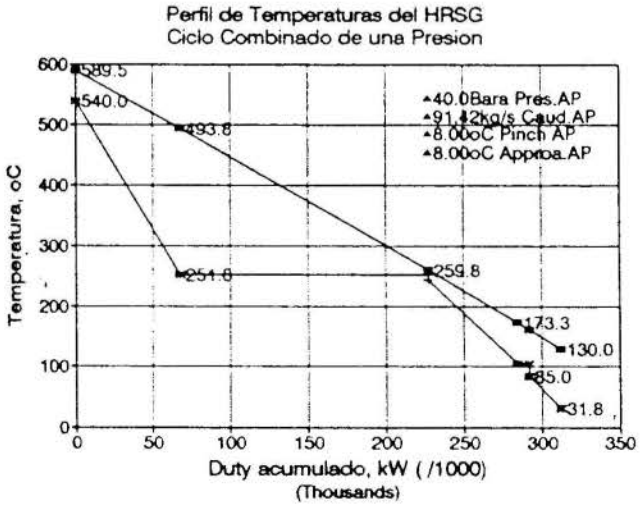


Figura 1: Perfil de temperaturas del HRSG, vapor de 40 Bara

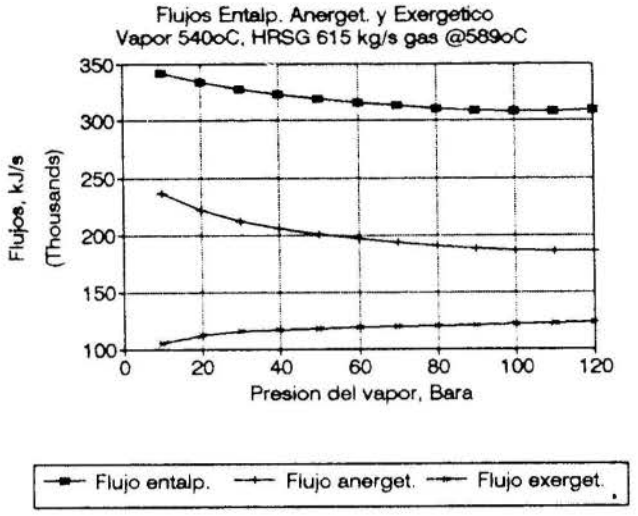


Figura 2: Variación de los flujos entálpico, anergético y exergético del vapor producido por el HRSG de 1 presión.

La generación de entropía en el proceso de transferencia térmica en el HRSG se reduce al aumentar la presión, por lo que la exergía del caudal de vapor producido aumenta, lo que se observa en la Figura 2.

La figura precedente corresponde a una temperatura constante del vapor sobrecalentado, adoptado conservadoramente en en 540 °C. Valores mayores resultan favorables no solo por la reducción de las irreversibilidades en el sobrecalentador, sino porque permite la adopción de mayores presiones por aliviar el problema de la humedad del vapor al final de la expansión. A pesar de la relativamente pobre transferencia de calor sin cambio de fase tipo gas - gas que ocurre en el sobrecalentador, se han reportado valores de diferenciales mínimos del orden de 20 °C o menores [Ansaldo, 1995].

En la Figura 3 se muestran los rendimientos térmicos netos y el título del vapor al final de la expansión, calculados para una turbina con un rendimiento isoentrópico del 84%, y una presión de condensación de 0.045 Bara

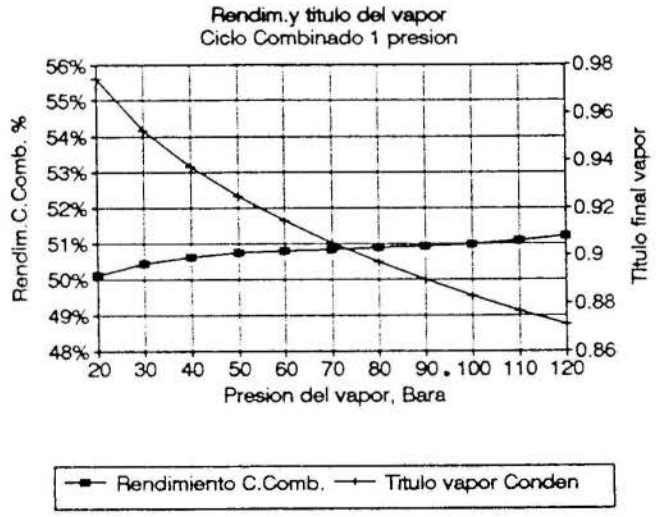


Figura 3: Rendimiento neto del ciclo combinado, y título del vapor a condensación.

CICLO COMBINADO CON BOTTOMING DE 2 PRESIONES

Resulta claro que el esquema precedente puede ser mejorado en cuanto a la recuperación en el HRSG, permitiendo que su seccion de BP genere todo el vapor posible hasta un pinch point de 8 °C, el que es sobrecalentado e inyectado a la turbina en la correspondiente sección. Esto produce dos efectos favorables: por un lado incrementa el flujo exergético total ingresante a la turbina de vapor, y por el otro, al ingresar a una temperatura algo superior a la del vapor en expansión en la turbina, mejora el titulo final, aunque este efecto es poco significativo debido al relativamente bajo caudal de BP.

En la Figura 4 se presenta el perfil de temperaturas del HRSG, para una presión de AP de 60 Bara, y de BP de 5.6 Bara, que muestra claramente la mayor transferencia entálpica a través del desplazamiento del final del enfriamiento de los gases a un punto de mayor duty y menor temperatura a chimenea comparado con el caso anterior (Figura 1), aún operando con una presión mayor en un 50%.

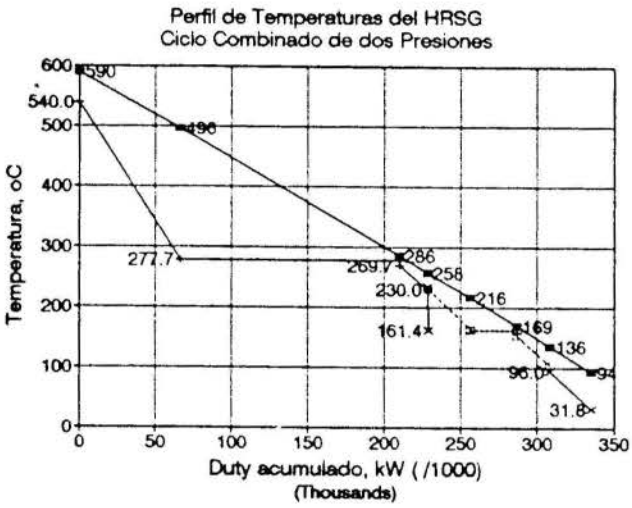


Figura 4: Perfil de temperaturas del HRSG de 2 presiones, 60 Bara, 540 °C en AP, 5.6 Bara, 280 °C en BP.

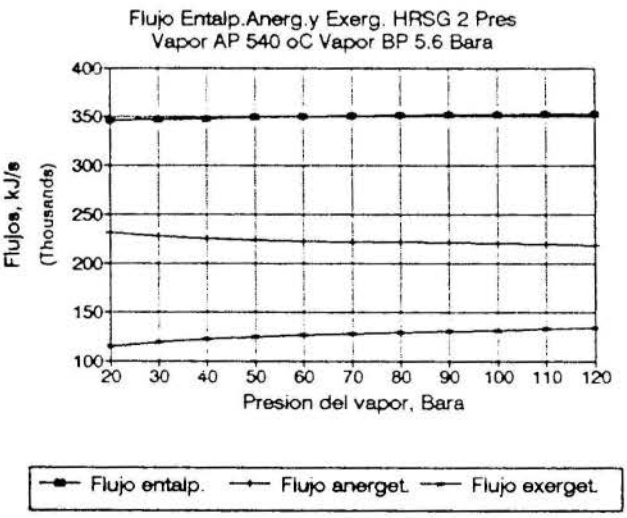


Figura 5: Variación de los flujos entálpico, anergético y exergético del vapor producido en el HRSG de 2 presiones.

A efecto de buscar la condición de mínima generacion de entropia en el HRSG, evitando diferencias de temperaturas excesivas con el vapor en expansión en la turbina de vapor, el sobrecalentador de BP ha sido ubicado en una posición a determinar, intermedia entre los dos economizadores de AP

Debido a que al aumentar la presión en general se reduce la recuperación en AP, queda un mayor remanente en los gases a ser recuperado en la sección de BP, por lo que su caudal de producción de vapor aumenta, lo que contribuye a un aumento mayor de la eficiencia del ciclo combinado al poder considerar presiones de AP ligeramente mayores, con relación al esquema de una única presión. La recuperación entalpica resulta mayor que en el caso de una presión debido al aporte del vapor de BP, pero su contenido exergético es bajo, como puede apreciarse en la Figura 5.

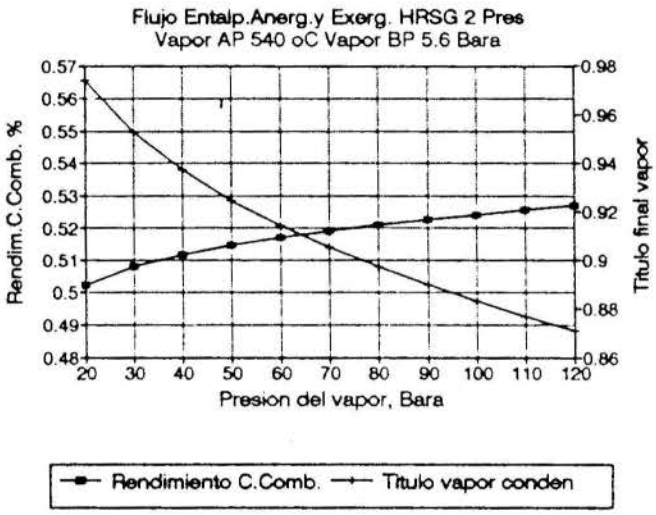


Figura 6: Rendimiento neto del ciclo combinado de dos presiones, y titulo del vapor a condensacion.

En la Figura 6 se muestran los valores del rendimiento del ciclo combinado, y el título del vapor a condensación, calculados para un rendimiento isoentrópico del 84%, y una presión de condensacion de 0.045 Bara en la que se observa la limitación al aumento de presión del vapor de AP que impone el titulo del vapor a condensación. La mejora de rendimiento del ciclo debe ser atribuida pues a una mayor recuperación a traves del vapor de BP, debiendo tener la TV capacidad para su admisión.

CICLO COMBINADO CON BOTTOMING DE 3 PRESIONES

Una forma efectiva de resolver el problema del titulo del vapor a condensación es la introducción del *concepto Ferranti*, o del *recalentamiento del vapor* a una presión intermedia, o MP. El vapor sobrecalentado de AP es expandido en el cuerpo de AP de la turbina hasta una presión menor (MP), y posteriormente recalentado para ser expandido en los cuerpor de MP y BP, según un esquema similar al de dos presiones tratado arriba.

Puesto que el HRSG tiene capacidades de generación marginales a menores presiones, se produce vapor sobrecalentado de MP, el que se suma al escape del cuerpo de AP, para pasar el total al recalentador.

Si el paquete del sobrecalentador se ubica a continuación del recalentador, los gases habrán sufrido un enfriamiento por lo que no será posible calentar el vapor sobrecalentado a una temperatura tan elevada como el recalentado. Esto puede ser solucionado integrando ambos paquetes en un bloque sobrecalentador - recalentador con tubos alternados, con lo que se logran temperaturas de salida prácticamente iguales. .

Calculadas las transferencias de calor y generación de entropía para casos comparables de ambas disposiciones resultan:

Parametro	Lugar	RH + SH		Bloque integrado	
Calor transf.	SH	49049.3		55827.3	
Calor transf.	RH	37575.7		31756.8	
Calor transf.	Total		86624.9		87584.2
Entropía	SH	10.5496		12.1282	
Entropía	RH	7.8012		4.1356	
Entropía	Total		18.3508		16.2639

Tabla 1: Valores comparativos entre la disposición RH + SH, y el bloque integrado RH/SH.

De la comparación de los valores dados en la tabla se ve que el sistema integrado presenta una menor generación de entropía que en el conjunto [recalentador + sobrecalentador], y una mayor recuperación de calor, ambos factores tendientes a la obtención de mayor potencia en el ciclo de bottoming, para el msmo consumo de combustible. En el resto de los paquetes de intercambio térmico, los valores son similares.

En la Figura 9 se muestra el esquema de flujos con sus correspondientes parámetros del ciclo de bottoming del ciclo Brayton - Ferranti de 3 presiones con bloque integrado sobrecalentador - recalentador, y en la Figura 7, el perfil de temperaturas del HRSG con paquetes separados [RH+SH].

Obsérvese comparando con los perfiles de temperaturas de los sistemas de una y dos presiones, el acercamiento logrado entre ambas curvas o sea la reducción de la creación de entropía en el proceso de transferencia térmica en el HRSG lo que deberá ser evaluado considerando la mayor complejidad y costo de capital, y la reducción de la potencia de la TG por contrapresión.

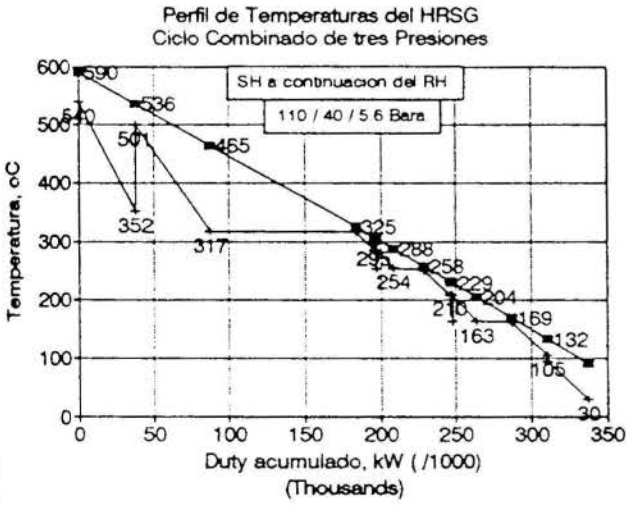


Figura 7: Perfil de temperaturas del HRSG de 3 presiones con sobrecalentador y recalentador separados.

En la Figura 8 se presenta el perfil de temperatura del HRSG con el bloque sobrecalentador / recalentador integrado.

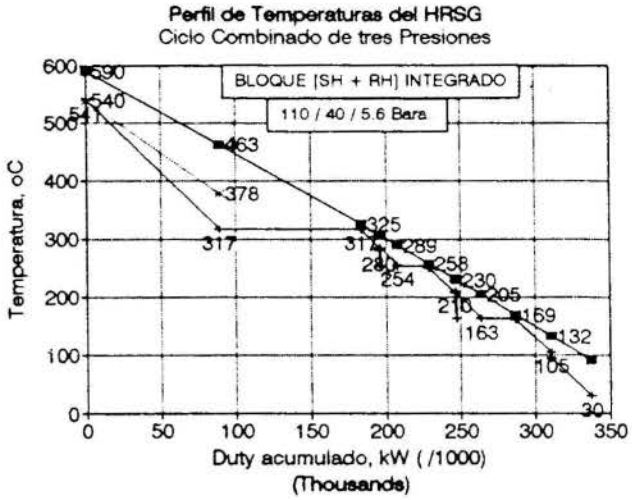


Figura 8: Perfil de temperaturas del HRSG de tres presiones con bloque sobrecalentador / recalentador integrado

El problema de la humedad del vapor a condensación no resulta limitante, para los parámetros del ciclo indicados en la Figura 9, es del 92%, siendo la eficiencia neta global del 54%, para un rendimiento isoentrópico del 83 y 87% en AP y BP.

CONCLUSIONES

Si bien el rendimiento exergético de un HRSG es considerablemente mayor que el de un generador convencional de vapor, es posible mejorar el intercambio exergético dentro de límites practicables mediante una adecuada selección de los parámetros del agua / vapor.

El aumento de la eficiencia y la temperatura de los gases de escape de las turbinas de gas, esperable en el futuro, permitirá incrementar aún mas el rendimiento del ciclo combinado

REFERENCIAS

Ansaldo, Cobra Combined Cycle Power Plants, 1995.

Bejan, A. "Advanced Engineering Thermodynamics", John Wiley & Sons, New York, 1988.

Brandt, D.E, and Wesorick, G.E. Power Generation, 1992

Wilson, D.G. "The design of High Efficiency Turbomachinery and Gas Turbines. The MIT Press. Cambridge Mass., 1984

SUMMARY

Heat Recovery Steam Generator (HRSG) links topping and bottoming units of a combined cycle. For a given topping unit, (gas turbine), overall thermal efficiency could be improved by system design, maximizing total heat transfer duty while minimizing entropy generation in the unfired HRSG. This could be done by suitablely selecting water-steam parameters (pressure and temperature) in a one or multi-pressure HRSG, taking into account steam turbine related restrictions.

SH y RH en bloque

BOTTOMING DE UN CICLO COMBINADO DE TRES PRESIONES

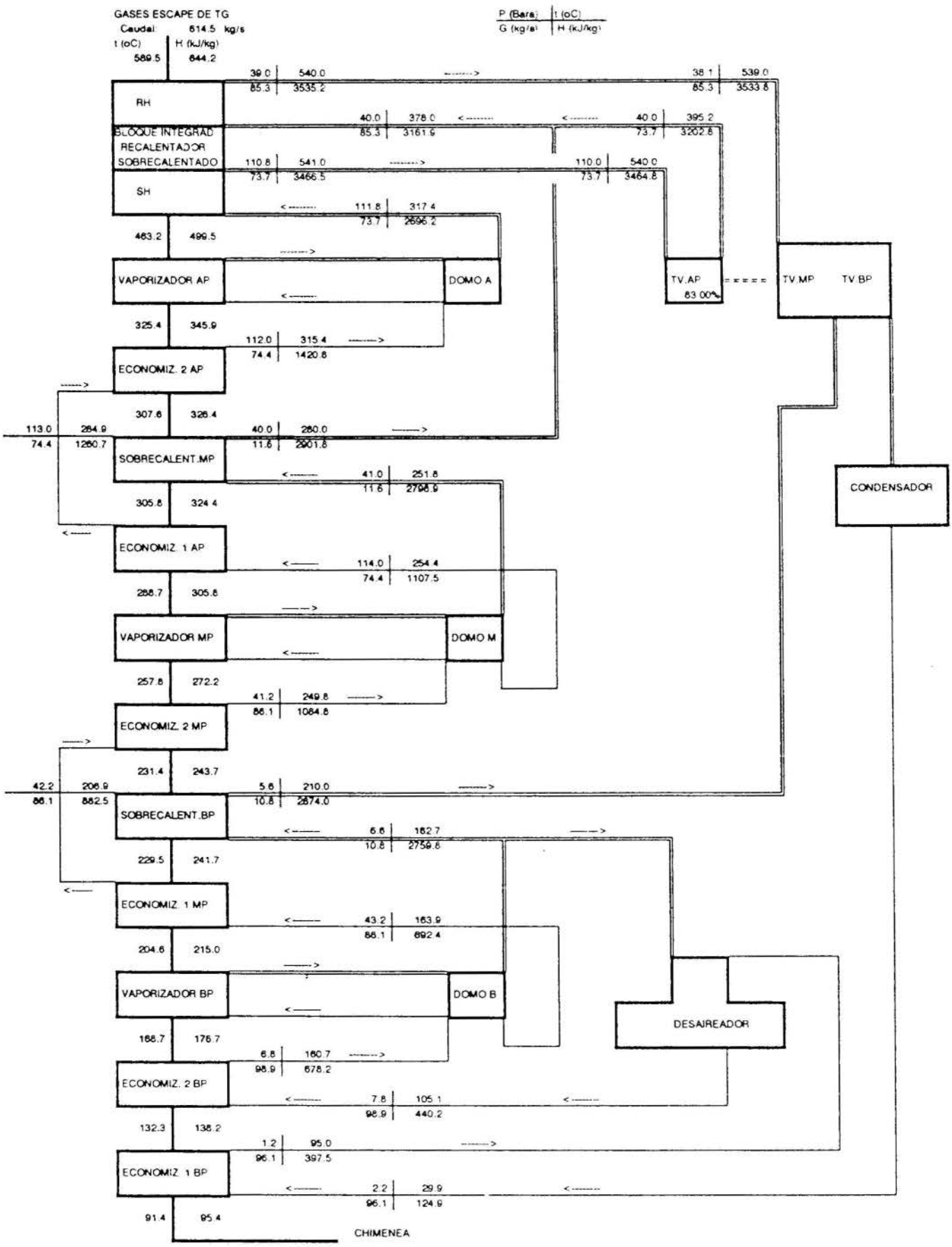


FIGURA 9: BOTTOMING DE UN CICLO COMBINADO DE 3 PRESIONES CON BLOQUE [SH - RH] INTEGRADO

ABCM

ANÁLISE EXERGÉTICA E ECONÔMICA DE PLANTAS TÉRMICAS SOB CONDIÇÕES DE INCERTEZA

Roberto A. Almeida
Afonso H. M. Santos
Edson C. Bortoni
Grupo de Energia/IEM
Escola Federal de Engenharia de Itajubá
37500-000 - Itajubá - MG - Brasil

RESUMO

Apresenta-se um método de análise termoeconômica que considera as incertezas associadas, por exemplo, às leituras de vazão mássica, temperatura e pressão, além daquelas relacionadas com os custos envolvidos, objetivando obter as distribuições probabilísticas dos custos associados aos produtos de uma planta térmica. Desenvolve-se um modelo matricial de análise termoeconômica que faz uso do Método de Monte Carlo e o aplica a uma planta de cogeração hipotética. Os resultados obtidos são sempre distribuições, assumidas como Normais. Com os resultados é possível proceder análises econômicas enfocando o risco.

INTRODUÇÃO

A termoeconomia vem ocupando um lugar de destaque na área térmica, principalmente pelo atual interesse na produtividade e na competitividade. Os enfoques que têm sido dado em trabalhos recentes são exclusivamente determinísticos, não incorporando as incertezas inerentes aos estados.

A proposição deste trabalho é desenvolver um ferramental que permita dar um tratamento estatístico às variáveis envolvidas. Utilizar-se-á, para tanto, desenvolvimentos algébricos e de simulação, e combinações destes, objetivando tornar o processo de fácil implementação computacional.

Os resultados obtidos podem ser utilizados em análises de investimentos ou contratuais, incorporando o risco como parâmetro de decisão.

FUNDAMENTOS ESTATÍSTICOS

Observa-se uma razoável variação nas grandezas de uma planta de cogeração, notadamente, temperaturas, pressões, vazões, demandas de calor e eletricidade e poder calorífico dos combustíveis. Necessita-se, portanto, de ferramentas estatísticas para manipular tais variáveis.

Neste artigo será utilizado inúmeras vezes o método de Monte Carlo, cuja vantagem é a sua flexibilidade, podendo incorporar as mais diferentes operações, facilitando o trabalho computacional. O princípio deste método é a realização de um elevado número de simulações, sendo que a cada simulação sorteiam-se valores para as variáveis aleatórias. Esses sorteios têm, entretanto, que respeitar as distribuições que definem cada uma das variáveis. Este método é minuciosamente apresentado em Hammesrley & Handscomb (1964).

A utilização de método probabilístico exige um bom conhecimento das variáveis envolvidas, de maneira a se definir suas distribuições. Quando este conhecimento não é suficiente pode-se fazer uso da distribuição triangular. Neste caso, basta conhecer os valores superior (Vs), inferior (Vi) e o mais provável (Vmp), para definir as distribuições. Embora o método de Monte Carlo possa simular qualquer distribuição, é mais fácil, computacionalmente, trabalhar com distribuições normais. Utilizando-se as eq. (1) e (2), pode-se, através da distribuição triangular, obter a média e o desvio padrão correspondente à distribuição normal, considerando um intervalo de confiança de 80%.

$$\mu = \frac{Vs + 2 \cdot Vmp + Vi}{4} \tag{1}$$

$$\sigma = \frac{Vs - Vi}{2{,}65} \tag{2}$$

O método de Monte Carlo corresponde ao sorteio das variáveis aleatórias, respeitando-se as suas incertezas e correlações. Para tanto, tem que se respeitar as suas distribuições, assuimidas como normais, e as covariâncias.

Seja $\sigma_{i,j}$ a covariância entre as variáveis aleatórias xi e xj e σ^2_i e σ^2_j as suas variâncias. Pode-se fazer o sorteio de n variáveis aleatórias $\tilde{y}$ independentes, consideradas normais (média igual a zero e desvio padrão igual a 1) Através de uma transformação linear, dada por uma matriz F, pode-se gerar n variáveis de $\tilde{x}$ que respeitem as variâncias e covariâncias, dadas pela matriz variância-covariância (Σx), desde que se faça um deslocamento das variáveis x para a origem. Assim:

$$\tilde{X} - \mu_x = F \cdot \tilde{Y} \tag{3}$$

mas sabe-se que:

$$\Sigma_x = \Sigma_{x-\mu} \tag{4}$$

daí chega-se à:

$$\Sigma_x = F \cdot \Sigma_y \cdot F' \tag{5}$$

Como as variáveis y são normais padronizadas independentes e Σ_Y é uma matris identidade, tem-se

$$\Sigma_X = F \cdot F' \tag{6}$$

A matrix Σx é conhecida, o que permite calcular os elementos de F. Porém, existem muitas matrizes que satisfazem tal equação. Uma alternativa que facilita o cálculo corresponde a adotar-se F como sendo uma matriz triangular. Desta maneira ter-se-á um sistema que pode ser resolvido por simples substituição sucessiva.

De posse dos elementos (f) de F volta-se à eq. 3 para o sorteio das variáveis x. Genericamente, tem-se x_{is} (i-ézima variável sorteada) dada por:

$$x_{is} = \mu_{xi} + \sum_{t=1}^{n}\left(f_{i,t} - y_{ts}\right) \tag{7}$$

ANÁLISE EXERGÉTICA

Planta de cogeração. No sistema de cogeração considerado, que consome óleo combustível de uma fonte externa "FC", o vapor produzido na caldeira "A" é expandido na turbina de extração/condensação do turbo-gerador "B", abastecendo o processo industrial com 103 t/h no estado saturado a 13 bar e gerando 20 MW de energia elétrica.

A Figura 1 apresenta a planta de cogeração subdividida em subsistemas e seus respectivos fluxos exergéticos. Os fluxos referentes aos pontos 11, 12 e 13 têm exergia zero, pois se considera que estes fluxos são retirados ou lançados ao ambiente com as mesmas caracteristicas termodinâmicas do ambiente.

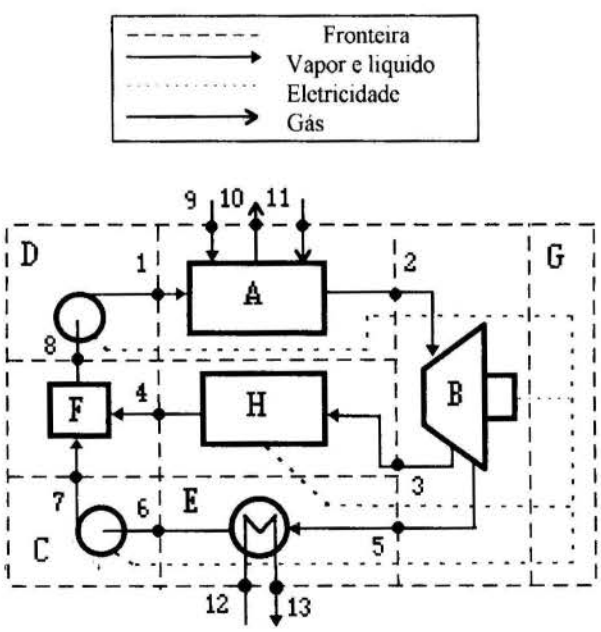


Figura 1. Planta de cogeração em estudo

Interação exergética. Ao fluxo liquido de exergia, que entra (Σ_e) ou que sai (Σ_s) de um subsistema, denomina-se interação exergética (e) (McGovern & O'toole, 1992) e pode ser calculada pela eq. (8).

$$e = \sum_e \dot{m} \cdot \left[\left(h - h_0\right) - t_0 \cdot \left(s - s_0\right)\right] - \sum_s \dot{m} \cdot \left[\left(h - h_0\right) - t_0 \cdot \left(s - s_0\right)\right] \tag{8}$$

onde: "$\dot{m}$" é o fluxo mássico, "h" e "s" é a entalpia e a entropia do fluido de trabalho, respectivamente e o subscrito "0" indica tratar-se do meio ambiente.

Como descrito inicialmente, as incertezas nas grandezas de interesse podem ser avaliadas estatisticamente, fazendo uso de registros dos históricos. Assim, é possível calcular a distribuição de probabilidade da interação exergética (e) em função das distribuições de probabilidade da temperatura (t), da pressão (p) e do fluxo de massa ($\dot{m}$).

Tabela 1 - Características Termodinâmicas dos Fluxos

K	T (°C)		P (bar)		$\dot{m}$(t/h)	
	μ	σ	μ	σ	μ	σ
1	145,8	7,30	60,00	3,00	144,0	7,20
2	450,0	22,5	60,00	3,00	144,0	7,20
3	VS	9,58	13,00	0,65	103,0	5,15
4	LS	9,58	13,00	0,65	103,0	5,15
5	VS	1,95	0,07	0,00	41,0	2,05
6	LS	1,95	0,07	0,00	41,0	2,05
7	39,5	2,00	13,00	0,65	41,0	2,05
8	145,2	7,30	13,00	0,65	144,0	7,20
9	O.C*		-		8,50	0,42
10	-		-		-	-
11	-		-		-	-
12	-		-		-	

* óleo combustível - pci = 45.562 ±5% MJ/t - BEN (1994)

Com base nos dados da tabela 1, é possível, utilizando o método de Monte Carlo, sortear uma série de valores para T, P e $\dot{m}$. Então se calcula a média da interação exergética, representada pelo vetor (μ_E).

$$\mu_E = \begin{bmatrix} 3{,}9 \cdot 10^5 \\ 9{,}5 \cdot 10^4 \\ 7{,}0 \cdot 10^0 \\ 2{,}1 \cdot 10^2 \\ 4{,}5 \cdot 10^3 \\ 3{,}5 \cdot 10^3 \\ 7{,}5 \cdot 10^4 \\ 7{,}2 \cdot 10^4 \\ 1{,}8 \cdot 10^5 \\ 4{,}0 \cdot 10^0 \\ 1{,}3 \cdot 10^2 \\ 7{,}5 \cdot 10^4 \end{bmatrix}$$

É possível calcular os elementos da matriz variância-covariância das interações exergéticas (Σ_E), que é mostrada no final deste texto. Cada elemento pode ser calculado por (9).

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{n=1}^{N}\left[\left(e_{i_n} - \mu_{e_i}\right) \cdot \left(e_{j_n} - \mu_{e_j}\right)\right] \tag{9}$$

onde i e j são as interações. N é o número de valores sorteados para i e j. μ é a média calculada anteriormente e σ_{ij} é a covariância, que se torna em variância quando i é igual a j (σ^2_i). O fluido de trabalho (vapor e água líquida) pode ser considerado como um subsistema (FT) que consome, armazena ou fornece exergia. Esta consideração associada ao conceito de interação exergética permite representar o sistema de cogeração pelo diagrama mostrado na Figura 2. Estes conceitos estão melhor descritos em Almeida (1993).

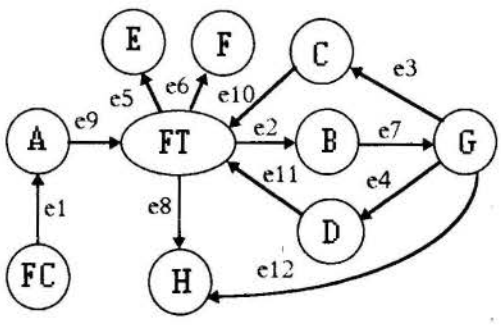


Figura 2: Diagrama de interação exergética

Matriz incidência. Os sentidos das interações exergéticas, mostrados na Figura 2, podem ser representados pela matriz de incidência I(m x n) apresentada em (10).

Esta matriz não apresenta incerteza alguma, pois é função da topologia da planta de cogeração.

$$
I = \begin{array}{c} \\ A \\ B \\ C \\ D \\ E \\ F \\ G \\ FT \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 \end{array} \\
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
0 & -1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 1 & 1 & 0
\end{bmatrix}
\end{array}
\quad (10)
$$

Destruição de exergia. A exergia destruída (D) nos equipamentos do sistema de cogeração pode ser calculada deterministicamente pela eq. (11), onde E é o vetor composto pelas n interações exergéticas. O símbolo (~) sobre E e D indica que seus elementos contém incertezas.

$$\tilde{D} = I \cdot \tilde{E} \qquad (11)$$

portanto, os valores médios de D, compõem o vetor μ_D, são determinados pela eq. (12).

$$\mu_D = I \cdot \mu_E \qquad (12)$$

A matriz variâncias-covariâncias Σ_D é dada pela eq. (13) e I e I' são, respectivamente, a matriz de incidência e a sua transposta.

$$\Sigma_D = I \cdot \Sigma_E \cdot I' \qquad (13)$$

O resultado das eq. (12) é apresentado a seguir, e a respectiva matriz variância-covariância é apresentado no final deste trabalho.

$$\mu_D = \begin{bmatrix} 4{,}3 \cdot 10^5 \\ 3{,}8 \cdot 10^4 \\ 1{,}2 \cdot 10^1 \\ 2{,}1 \cdot 10^3 \\ 8{,}7 \cdot 10^3 \\ 7{,}5 \cdot 10^3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Eficiência de Segunda Lei. A eficiência exergética dos subsistemas da planta de cogeração pode ser calculada pela eq. (14).

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\tilde{e}_s}{\tilde{e}_e} \qquad (14)$$

onde $\tilde{e}_s$ e $\tilde{e}_e$ são, respectivamente, os elementos correspondentes dos vetores que contém as interações exergéticas que saem (s) e que entram (e) nos subsistemas. Utilizando-se o método de Monte Carlo, calculam-se a média das eficiências que compõe o vetor μ_ε e a matriz variância-covariância dada por Σ_ε, que é apresentada no final deste artigo.

$$\mu_\varepsilon = \begin{bmatrix} 4{,}4 \cdot 10^1 \\ 8{,}1 \cdot 10^1 \\ 6{,}4 \cdot 10^1 \\ 6{,}1 \cdot 10^1 \\ 0 \\ 0 \\ 1{,}0 \cdot 10^2 \\ 1{,}0 \cdot 10^2 \end{bmatrix} (\%)$$

ANÁLISE TERMOECONÔMICA

O custo exergoeconômico (π), ou custo do fluxo exergético, é decorrente do custo operação e manutenção e do investimento feito nos equipamentos, investimentos, estes, que compõem o vetor "Z". O custo do investimento foi estimado considerando-se uma distribuição triangular. O custo de operação e manutenção foi considerado igual ao preço do combustível consumido, US$ 160/t (BEN, 1994) e se supôs que a planta de cogeração opera 648 h/mês. A média e o desvio padrão obtidos para os investimentos e para o custo de operação e manutenção são mostradas nos vetores μ_z e σ_z.

$$\mu_Z = \begin{bmatrix} -1{,}9\cdot 10^4 \\ -3{,}1\cdot 10^4 \\ -2{,}7\cdot 10^1 \\ -5{,}7\cdot 10^1 \\ -1{,}7\cdot 10^3 \\ -1{,}4\cdot 10^1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_Z = \begin{bmatrix} 6{,}4\cdot 10^2 \\ 1{,}3\cdot 10^3 \\ 2{,}3\cdot 10^0 \\ 4{,}2\cdot 10^0 \\ 1{,}3\cdot 10^2 \\ 1{,}3\cdot 10^0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Efetuando-se o balanço de custos, em todos os subsistemas da planta de cogeração, obtém-se um sistema de equações lineares cuja representação matricial é:

$$I\ \tilde{\Pi} = -\tilde{Z} \qquad (15)$$

onde Π é o vetor composto pelo custo monetário das n interações exergéticas.

A eq. 15 não tem solução factível, pois a matriz incidência é retangular (mxn), portanto são necessárias n-m equações auxiliares para torná-la factível. Estas equações são obtidas pelas seguintes proposições econômicas (Almeida, 1993): O valor exergoeconômico de um combustível é igual ao seu custo (US$/MJ); os custos exergoeconômicos unitários são iguais para todas as interações exergéticas que saem de um subsistema.

Assim os custos exergoeconômicos podem ser calculados pela eq. (16)

$$\tilde{\Pi} = \tilde{A}^{-1}\ \tilde{B} \qquad (16)$$

onde "A", mostrada a seguir, é a matriz formada pelos coeficientes do sistema de equações e "B" é o vetor composto pelas constantes desse sistema, caracterizado por suas médias (μ_B) e desvios-padrão (σ_B).

$$A = \begin{bmatrix} & & & & & & & I & & & & \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\tilde{e}_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\tilde{e}_8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\tilde{e}_3 & -1/\tilde{e}_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\tilde{e}_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1/\tilde{e}_{12} \end{bmatrix}$$

$$\mu_B = \begin{bmatrix} -1{,}9\cdot 10^4 \\ -3{,}1\cdot 10^4 \\ -2{,}7\cdot 10^1 \\ -5{,}7\cdot 10^1 \\ -1{,}7\cdot 10^3 \\ -1{,}4\cdot 10^1 \\ 0 \\ 0 \\ 8{,}7\cdot 10^5 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \sigma_B = \begin{bmatrix} 6{,}4\cdot 10^2 \\ 1{,}3\cdot 10^3 \\ 2{,}3\cdot 10^0 \\ 4{,}2\cdot 10^0 \\ 1{,}3\cdot 10^2 \\ 1{,}3\cdot 10^0 \\ 0 \\ 0 \\ 2{,}7\cdot 10^4 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Uma forma de se operar a eq. (16) é utilizar o método de Monte Carlo, sorteando-se todos os elementos de $\tilde{A}$ e $\tilde{B}$ e calculando-se Π de maneira determinística para cada sorteio. Na seqüência calcula-se o vetor das médias (μ_{Π}) e a matriz variância-covariância (Σ_{Π}), esta apresentada ao final do artigo.

$$\mu_{\Pi} = \begin{bmatrix} 6{,}4\cdot 10^2 \\ 1{,}3\cdot 10^3 \\ 2{,}3\cdot 10^0 \\ 5{,}1\cdot 10^5 \\ 4{,}8\cdot 10^1 \\ 1{,}7\cdot 10^3 \\ -1{,}7\cdot 10^3 \\ -1{,}4\cdot 10^1 \\ 5{,}4\cdot 10^5 \\ 3{,}9\cdot 10^5 \\ 8{,}9\cdot 10^5 \\ 7{,}6\cdot 10^1 \\ 1{,}7\cdot 10^3 \\ 5{,}4\cdot 10^5 \end{bmatrix}$$

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Analisando-se os resultados pode-se criticar o elevado risco de se ter custos negativos em alguns casos ($\mu<\sigma$), o que seria inaceitável. Entretanto isto somente tem sentido matemático. Uma maneira de se reduzir este risco é incorporar as covariâncias entre as variáveis de entrada, principalmente pressões e temperaturas. Neste caso ao invés de se ter vetores de variâncias, ter-se-ia matrizes de variância e covariância.

Os casos de maior risco de custo negativo estão associados às interações exergéticas das bombas. Os produtos, calor e energia elétrica fornecidos ao processo industrial apresentam uma boa distribuição de probabilidade.

A utilização deste método permite uma análise que incorpora o risco, isto é, obtém-se os custos das interações exergéticas, incluindo-se os produtos, calor e energia elétrica, sob uma forma de distribuição de probabilidade. Com isto, os contratos a serem estabelecidos, ou os novos investimentos, ou ainda, o planejamento da manutenção, podem ser analisados fixando-se um risco aceitável para o resultado econômico. Também é possível estabelecer uma carteira de investimentos (portafólio), incluindo as rentabilidades e os riscos associados (Almeida, 1995).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Almeida, R.A., "Alocação de Custos Segundo uma Visão Exergética: Aplicação à Indústria de Papel e Celulose", Dissertação de mestrado, Escola Federal de Engenharia de Itajubá, Itajubá, MG, Brasil, 1993.

Almeida, R.A., Santos, A.H.M. e Silveira, J.L., 1994, "Análise Exergoeconômica Aplicada ao Sistema de Cogeração de uma Indústria de Celulose", *Anais do V ENCIT*, São Paulo, SP, Brasil, pp. 77 -80

Almeida,R.A., Santos, A.H.M. e Kusevic, E.D., 1995, "Subsídios para o Estabelecimento de Contratos entre cogeradores e concessionárias", *Anais do XIII SNPETEE*, Camboriu, SC, Brasil, pp. GPT 07

Barnes, J.W., 1994, Statistical Analysis for Engineers and Scientists - A Computer Based Approach, ed. Mc-Graw Hill, USA.

BEN, 1994, "Balanço Energético Nacional", Ministério das Minas e Energias, Brasília, Brasil.

Hammesrley, J.M. and Handscomb, D.C., 1964, "Monte Carlo Method", Methuen, London.

McGovern and O'toole,"A Virtual System Concept for the Analysis of Network Plant", *Proceedings of the International Symposium on Efficiency, Cost, Optimazation and Simulation of Energy System*, pp. 155-166, Zaragoza, Spain, 1992.

ABSTRACT

It is shown a method for thermodynamic analysis that considers the inherent uncertainties, i.e., flow, temperature and pressure measurements and that associated to the costs, obtaining probabilistic distributions functions for the thermal plant products costs. A thermo-economic matricial model was developed employing the Monte Carlo method for a hypothetical cogeneration plant. It is considered that the results are always normal distributions. With the results in hands, it is possible to make theenical and economical analysis in a uncertainty environment.

$$\Sigma E = \begin{bmatrix}
3{,}8.10^{8} & -2{,}7.10^{6} & 7{,}0.10^{3} & -2{,}1.10^{4} & -4{,}9.10^{4} & -2{,}5.10^{6} & -4{,}0.10^{6} & 2{,}0.10^{6} & -3{,}1.10^{6} & 4{,}0.10^{3} & -1{,}6.10^{5} & -4{,}0.10^{6} \\
-2{,}7.10^{6} & 1{,}2.10^{9} & -1{,}8.10^{4} & -1{,}7.10^{6} & -1{,}5.10^{5} & 4{,}6.10^{5} & 9{,}3.10^{7} & -1{,}9.10^{7} & 1{,}0.10^{8} & -1{,}2.10^{4} & -9{,}0.10^{5} & 9{,}5.10^{7} \\
7{,}0.10^{3} & -1{,}8.10^{4} & 2{,}0.10^{3} & -2{,}0.10^{2} & 4{,}0.10^{1} & 2{,}0.10^{3} & -1{,}9.10^{4} & 4{,}0.10^{3} & -1{,}3.10^{4} & 1{,}0.10^{3} & 8{,}0.10^{1} & -2{,}0.10^{4} \\
-2{,}1.10^{4} & -1{,}7.10^{6} & -2{,}0.10^{2} & 1{,}2.10^{7} & 3{,}5.10^{4} & 3{,}8.10^{6} & -5{,}9.10^{5} & 5{,}2.10^{5} & -4{,}2.10^{6} & -2{,}0.10^{0} & 6{,}8.10^{6} & -1{,}2.10^{7} \\
-4{,}9.10^{4} & -1{,}5.10^{5} & 4{,}0.10^{1} & 3{,}5.10^{4} & 1{,}3.10^{5} & 2{,}3.10^{4} & -2{,}0.10^{5} & 1{,}9.10^{4} & 5{,}0.10^{3} & -1{,}1.10^{1} & 1{,}9.10^{4} & -2{,}4.10^{5} \\
-2{,}5.10^{6} & 4{,}6.10^{5} & 2{,}0.10^{8} & 3{,}8.10^{6} & 2{,}3.10^{4} & 5{,}3.10^{6} & 7{,}1.10^{5} & -3{,}1.10^{6} & 4{,}7.10^{5} & 1{,}0.10^{3} & 2{,}2.10^{6} & -3{,}1.10^{6} \\
-4{,}0.10^{6} & 9{,}3.10^{7} & -1{,}9.10^{4} & -5{,}9.10^{5} & -2{,}0.10^{5} & 7{,}1.10^{5} & 9{,}5.10^{7} & -1{,}5.10^{7} & 7{,}9.10^{7} & -1{,}2.10^{4} & -2{,}8.10^{5} & 9{,}6.10^{7} \\
2{,}0.10^{6} & -1{,}9.10^{7} & 4{,}0.10^{3} & 5{,}2.10^{5} & 1{,}9.10^{4} & -3{,}1.10^{6} & -1{,}5.10^{7} & 2{,}2.10^{7} & -5{,}8.10^{5} & 3{,}0.10^{3} & 2{,}9.10^{5} & -1{,}6.10^{7} \\
-3{,}1.10^{6} & 1{,}0.10^{8} & -1{,}3.10^{4} & -4{,}2.10^{6} & 5{,}0.10^{3} & 4{,}7.10^{5} & 7{,}9.10^{7} & -5{,}8.10^{5} & 1{,}1.10^{8} & -9{,}0.10^{3} & -2{,}4.10^{6} & 8{,}3.10^{7} \\
4{,}0.10^{3} & -1{,}2.10^{4} & 1{,}0.10^{3} & -2{,}0.10^{0} & -1{,}1.10^{1} & 1{,}0.10^{3} & -1{,}2.10^{4} & 3{,}0.10^{3} & -9{,}0.10^{3} & 1{,}0.10^{3} & 1{,}0.10^{2} & -1{,}3.10^{4} \\
-1{,}6.10^{5} & -9{,}0.10^{5} & 8{,}0.10^{1} & 6{,}8.10^{6} & 1{,}9.10^{4} & 2{,}2.10^{6} & -2{,}8.10^{5} & 2{,}9.10^{5} & -2{,}4.10^{6} & 1{,}0.10^{2} & 4{,}0.10^{6} & -7{,}1.10^{6} \\
-4{,}0.10^{6} & 9{,}5.10^{7} & -2{,}0.10^{4} & -1{,}2.10^{7} & -2{,}3.10^{5} & -3{,}1.10^{6} & 9{,}6.10^{7} & -1{,}6.10^{7} & 8{,}3.10^{7} & -1{,}3.10^{4} & -7{,}1.10^{6} & 1{,}1.10^{8}
\end{bmatrix}$$

$$\Sigma_D = \begin{bmatrix}
3{,}0.10^{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1{,}0.10^{5} \\
0 & 2{,}1.10^{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & -9{,}8.10^{3} & -1{,}1.10^{5} \\
0 & 0 & 6{,}4.10^{1} & 0 & 0 & 0 & -3{,}9.10^{1} & -2{,}5.10^{1} \\
0 & 0 & 0 & 5{,}4.10^{3} & 0 & 0 & -3{,}4.10^{3} & -2{,}0.10^{3} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 3{,}7.10^{2} & 0 & 0 & -3{,}7.10^{2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2{,}3.10^{3} & 0 & -2{,}3.10^{3} \\
0 & -9{,}8.10^{3} & -3{,}9.10^{1} & -3{,}4.10^{3} & 0 & 0 & 2{,}4.10^{4} & 0 \\
-1{,}0.10^{4} & -1{,}1.10^{4} & -2{,}5.10^{1} & -2{,}0.10^{3} & -3{,}7.10^{2} & -2{,}3.10^{3} & 0 & 3{,}1.10^{4}
\end{bmatrix}$$

$$\Sigma_\varepsilon = \begin{bmatrix}
3{,}4.10^{-1} & -1{,}0.10^{-2} & 1{,}2.10^{-2} & -4{,}1.10^{-2} & 0 & 0 & 1{,}7.10^{-2} & 1{,}7.10^{-2} \\
-1{,}0.10^{-2} & 6{,}7.10^{-2} & -8{,}0.10^{-3} & 1{,}1.10^{-2} & 0 & 0 & -4{,}0.10^{-2} & -4{,}0.10^{-3} \\
1{,}2.10^{-2} & -8{,}0.10^{-3} & 7{,}8.10^{-0} & -3{,}0.10^{-3} & 0 & 0 & 1{,}6.10^{-2} & 1{,}6.10^{-2} \\
-4{,}1.10^{-2} & 1{,}1.10^{-2} & -3{,}0.10^{-3} & 4{,}2.10^{-1} & 0 & 0 & -1{,}0.10^{-2} & -1{,}0.10^{-2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1{,}7.10^{-2} & -4{,}0.10^{-3} & 1{,}6.10^{-2} & -1{,}0.10^{-2} & 0 & 0 & 6{,}0.10^{-3} & 6{,}0.10^{-3} \\
1{,}7.10^{-2} & -4{,}0.10^{-3} & 1{,}6.10^{-2} & -1{,}0.10^{-2} & 0 & 0 & 6{,}0.10^{-3} & 6{,}0.10^{-3}
\end{bmatrix}$$

$$\Sigma_\Pi = \begin{bmatrix}
7{,}4.10^{8} & 4{,}2.10^{8} & 5{,}2.10^{4} & 9{,}8.10^{6} & 4{,}5.10^{4} & 4{,}0.10^{2} & 4{,}2.10^{8} & 3{,}2.10^{8} & 7{,}4.10^{8} & 5{,}2.10^{4} & 9{,}8.10^{6} & 4{,}1.10^{8} \\
4{,}2.10^{8} & 5{,}6.10^{8} & -8{,}3.10^{4} & 7{,}8.10^{6} & 3{,}3.10^{4} & 7{,}0.10^{2} & 5{,}6.10^{8} & -5{,}5.10^{7} & 4{,}2.10^{8} & -8{,}3.10^{4} & 7{,}8.10^{5} & 4{,}8.10^{8} \\
5{,}2.10^{4} & -8{,}3.10^{4} & 1{,}9.10^{4} & 4.10^{3} & 1{,}0.10^{2} & 2{,}0.10^{1} & -8{,}0.10^{4} & 1{,}6.10^{5} & 5{,}4.10^{4} & 1{,}9.10^{4} & 4{,}0.10^{3} & -1{,}0.10^{5} \\
9{,}8.10^{6} & 7{,}8.10^{7} & 4{,}0.10^{3} & 1{,}5.10^{8} & 9{,}0.10^{3} & 8{,}0.10^{2} & 7{,}8.10^{7} & 8{,}0.10^{7} & 9{,}4.10^{6} & 2{,}0.10^{3} & 1{,}5.10^{8} & -7{,}0.10^{7} \\
4{,}5.10^{4} & 3{,}3.10^{4} & 1{,}0.10^{2} & 9{,}0.10^{3} & 1{,}7.10^{4} & -3{,}0.10^{0} & 2{,}8.10^{4} & 4{,}0.10^{3} & 4{,}4.10^{4} & 1{,}0.10^{2} & 9{,}0.10^{3} & 1{,}9.10^{4} \\
4{,}0.10^{2} & 7{,}0.10^{2} & 2.10^{0} & 8{,}0.10^{2} & -3{,}0.10^{0} & 2{,}0.10^{0} & 8{,}0.10^{2} & 4{,}0.10^{2} & 4{,}0.10^{2} & 2{,}0.10^{0} & 8{,}0.10^{2} & 8{,}0.10^{0} \\
4{,}2.10^{8} & 5{,}6.10^{8} & -8{,}0.10^{4} & 7{,}8.10^{7} & 2{,}8.10^{4} & 8{,}0.10^{2} & 5{,}6.10^{8} & -5{,}4.10^{7} & 4{,}2.10^{8} & -8{,}0.10^{4} & 7{,}8.10^{7} & 4{,}8.10^{8} \\
3{,}2.10^{8} & -5{,}5.10^{7} & 1{,}6.10^{5} & 8{,}0.10^{7} & 4{,}0.10^{3} & 4{,}0.10^{2} & -5{,}4.10^{7} & 4{,}6.10^{8} & 3{,}2.10^{8} & 1{,}6.10^{5} & 8{,}0.10^{7} & -1{,}3.10^{8} \\
7{,}4.10^{8} & 4{,}2.10^{8} & 5{,}4.10^{4} & 9{,}4.10^{6} & 4{,}4.10^{4} & 4{,}0.10^{2} & 4{,}2.10^{8} & 3{,}2.10^{8} & 7{,}4.10^{8} & 5{,}3.10^{4} & 9{,}4.10^{6} & 4{,}1.10^{8} \\
5{,}2.10^{4} & -8{,}3.10^{4} & 1{,}9.10^{4} & 2{,}0.10^{3} & 1{,}0.10^{2} & 2{,}0.10^{0} & -8{,}0.10^{4} & 1{,}6.10^{5} & 5{,}3.10^{4} & 1{,}9.10^{4} & 2{,}0.10^{4} & -1{,}0.10^{5} \\
9{,}8.10^{6} & 7{,}8.10^{7} & 4{,}0.10^{3} & 1{,}5.10^{8} & 9{,}0.10^{3} & 8{,}0.10^{2} & 7{,}8.10^{7} & 8{,}0.10^{7} & 9{,}4.10^{6} & 2{,}0.10^{4} & 1{,}5.10^{8} & -7{,}0.10^{8} \\
4{,}1.10^{8} & 4{,}8.10^{8} & -1{,}0.10^{5} & -7{,}0.10^{7} & 1{,}9.10^{4} & 8{,}0.10^{0} & 4{,}8.10^{8} & -1{,}3.10^{8} & 4{,}1.10^{8} & -1{,}0.10^{5} & -7{,}0.10^{8} & 5{,}5.10^{8}
\end{bmatrix}$$

ABCM TERMOECONOMIA APLICADA A MANUTENÇÃO DE CENTRAIS TERMELÉTRICAS

Fabiano R. Carvalho,
Departamento de Geração
CESP-Companhia Energética de São Paulo
01227-200, São Paulo - SP- Brasil

Luiz A. Horta Nogueira
Instituto de Engenharia Mecânica
EFEI-Escola Federal de Engenharia de Itajubá
37500-000, Itajubá - MG - Brasil

RESUMO

O Método Termoeconômico constitui-se de uma ferramenta importante para o planejamento das atividades de manutenção em plantas térmicas, uma vez que é capaz de determinar, de forma racional, o custo gerado pela irreversibilidade de cada equipamento. Além disto, os efeitos associados a alteração dos parâmetros operacionais ou de projeto, podem ser estudados de forma detalhada, avaliando o impacto local e distribuído. Neste trabalho, após uma breve revisão sobre os custos de manutenção praticados em centrais termelétricas, é apresentada a aplicação do Método Termoeconômico, em uma central a vapor a resíduos ultraviscosos, considerando-se sobretudo os aspectos de interesse ao planejamento da manutenção.

INTRODUÇÃO

Nos sistemas termelétricos de potência as atividades de manutenção devem ser necessariamente efetuadas nos mais diversos equipamentos, como as caldeiras, turbinas, pré-aquecedores de condensado e bombas. Tais atividades, sejam preventivas ou corretivas, demandam recursos e afetam diretamente o desempenho e a disponibilidade da planta. Assim, o adequado planejamento da manutenção apresenta considerável interesse e constitui um tema importante para a operação econômica das centrais termelétricas. No presente trabalho a manutenção de plantas termelétricas é estudada com auxílio do Método Termoeconômico (Valero et al., 1986), que utiliza os fluxos exergéticos como fator ponderador de valor e atribui às irreversibilidades termodinâmicas as perdas ao longo dos processos de conversão e transporte energético.

Apresenta-se inicialmente uma discussão sobre os custos associados as atividades de manutenção em plantas térmicas, buscando sua parametrização com índices de custo mais globais e permitindo sua discriminação segundo os distintos equipamentos ou sistemas de interesse. Posteriormente, desenvolve-se a aplicação em uma central térmica a vapor a resíduos ultraviscosos, evidenciando o impacto econômico diferenciado da manutenção nos distintos equipamentos e as perspectivas de sua racionalização em bases termoeconômicas.

ESTIMATIVA DOS CUSTOS DE MANUTENÇÃO

Não é tarefa simples a estimativa dos custos de manutenção de centrais térmicas de potência. Diversos fatores influem sobre seu nível e sua estrutura, como a configuração, a localização e o regime de operação da central. Assim, uma estimativa consistente de valores para os custos de manutenção está associada a um levantamento considerável de dados, assim como a utilização de hipóteses que viabilizem a parametrização e tabulação desses valores. Infelizmente, este assunto tem sido aparentemente pouco explorado e na revisão bibliográfica efetuada não se obteve muitas referências. Certamente que a disponibilidade de uma ampla base de dados sobre custos de manutenção seria oportuna no sentido de sua racionalização.

Como os demais empreendimentos energéticos voltados para a geração de energia elétrica, os custos para as plantas termelétricas podem classificar-se em custos de geração e custos de investimento. Os custos de geração tipicamente correspondem à um ano de operação normal da usina e são devidos ao combustível, mão-de-obra (para operação, manutenção, administração), materiais e produtos consumidos, como óleo lubrificante e calcário, bem como serviços diversos. Os custos de investimento correspondem aos custos associados à formação do capital, como os equipamentos, inclusive sua montagem e a construção civil. A partir do estudo de custos de plantas convencionais a vapor, estes custos podem ser apresentados conforme mostra a Tabela 1, adaptada de (Rodriguez, 1981). Outra forma de classificar os custos de geração, é separando-se os componentes fixos dos variáveis. Os custos fixos representam a parcela dos custos de geração que independe da energia gerada e consequentemente do fator de capacidade ou do n° de horas de operação, sendo geralmente expressos em $/kW.ano. Eles incluem os custos de mão-de-obra para a operação, parte dos custos de mão-de-obra e materiais de manutenção e os custos de administração. Por sua vez, os custos variáveis são diretamente proporcionais à quantidade de energia produzida e geralmente são expressos em $/MWh. Eles incluem necessariamente os custos com combustível, os custos com outros produtos consumidos no processo, e parte dos custos de mão-de-obra e materiais de manutenção. Apresenta-se a seguir o estudo de custos de manutenção que permite sua estimativa de modo desagregado por equipamentos, a partir de valores do custo de capital.

Tabela 1 - Custos de capital em plantas térmicas a vapor

				-Planta da caldeira	45%
				-Planta da turbina	35%
		Equipamentos		-Tubulação, acessórios	10%
Diretos	**70%**	**Eletromecânicos**	**60%**	-Subestação	5%
				-Outros equipamentos	5%
		Instalação	**12%**		
		Construção	**21%**	-Obras civis	71%
				-Sist. de resfriamento	29%
		Outros	**7%**	-Terreno	43%
				-Projeto, organização	57%
Indiretos	**30%**				

Custos de Operação e Manutenção. É freqüente que os custos de manutenção sejam apresentados de modo agregado aos custos de operação, recebendo a denominação de custos de operação e manutenção (O&M). Tais custos incluem a mão-de-

obra da operação; a manutenção (mão-de-obra e materiais) e a administração de pessoal. A restrição dos custos de administração apenas ao de pessoal e a exclusão dos custos associados aos materiais consumíveis é uma prática recomendada pelo (EPRI, 1986), justificável pela simplificação que acarreta. Os custos de operação e manutenção (O&M) também podem ser classificados em custos fixos e variáveis. Ainda segundo o EPRI (1986), de uma forma prática, os custos totais de O&M podem ser divididos em fixos e variáveis, proporcionalmente ao fator de capacidade da usina. Assim, a porcentagem dos custos totais de O&M que são fixos é razoavelmente próxima do próprio fator de capacidade da usina, como mostra a Tabela 2, elaborada sobre uma base de dados bastante ampla de usinas americanas. Esta tabela fornece valores de custos de investimento e de geração para diversas tecnologias e combustíveis. Os custos de operação e manutenção (O&M), são também apresentados correlacionados ao custo total de capital (CTC), constituído de todos os investimentos, excluindo-se os juros durante a construção.

Custos de Manutenção e Custos de Capital. Para uma primeira estimativa, é freqüente relacionar-se os custos anuais de manutenção a uma porcentagem do custo total da planta, em função das condições do processo. Para as condições que prevalecem nas plantas termelétricas apontam-se custos de manutenção entre 1,0 a 3,0% do custo total da central, (EPRI, 1986). Deste modo, conhecido o custo de capital, poderia ser estimada uma faixa de variação para seu custo de manutenção, mas restam ainda como dificuldades determinar qual o valor a adotar na faixa apresentada, como conhecer detalhadamente a composição dos custos de manutenção em termos de suas parcelas fixas e variáveis, e como definir os custos individuais de manutenção dos diversos equipamentos constituintes da central, dentro dos propósitos deste trabalho.

Custos de Manutenção e Custos de O&M. Como mostrado na Tabela 2, a disponibilidade de uma base de dados real de custos de O&M, associada à possibilidade de estimar os custos de manutenção como percentuais do custo total de capital, permitiu uma análise comparativa entre os valores de custos de manutenção obtidos através de ambas formas e evidenciar o peso relativo de tais custos em relação aos demais custos de O&M. Para a desagregação dos custos estimados de manutenção, adotou-se a proporcionalidade em função do fator de capacidade. Estimaram-se os custos unitários de manutenção para percentuais entre 1,0 a 3,0 % do custo total da planta. A análise dos resultados mostrou que a consideração dos custos anuais de manutenção como sendo uma porcentagem do custo total de capital deve incluir o efeito da tecnologia empregada para geração termelétrica, uma vez que a relação entre os custos de manutenção e os de O&M apresentou grandes dispersão, tornando-se inconsistente para algumas situações. A capacidade da planta se mostrou menos influente.

Os custos de O&M apresentados na Tabela 2 foram determinados de modo independente do custo total da planta e podem portanto ser melhor explorados em um estudo de custos. Neste sentido cabe buscar outras relações entre os custos de manutenção e de O&M. Analisando os dados de custos de algumas plantas a vapor, também americanas, pode-se observar que de manutenção totalizam 67 % dos custos de O&M (EPRI, 1979). Conclusão análoga é apresentada por (Roser, 1993). Na falta de maiores informações, pode-se assumir, preliminarmente, a mesma distribuição para as demais tecnologias.

Tabela 2 - Custos de O&M e Custo Total de Capital (CTC) para diversas termelétricas americanas, (EPRI, 1986).

TECNOLOGIA	Capacidade	FC	CTC	O&M			O&M/CTC		
				T	F	V	T	F	V
	MW	%	$/kW	$/kW.ano		$/MWh	%		
Ciclo a Vapor-FGD[1]	2 X 1000	65	957	26,3	17,2	1,6	2,7	1,8	0,9
Carvão Betuminoso	2 X 500	65	1061	30,9	20,1	1,9	2,9	1,9	1,0
Ciclo a Vapor-FGD	2 X 500	65	1113	30,9	20,1	1,9	2,8	1,8	1,0
Carvão Linhita	2 X 500	65	1096	30,6	19,8	1,9	2,8	1,8	1,0
Ciclo a Vapor-FGD	1 X 750	65	1051	29,1	18,9	1,8	2,8	1,8	1,0
Carvão Pulverizado	1 X 750	65	1090	29,7	19,5	1,8	2,7	1,8	0,9
Ciclo a Vapor-AFBC[2]	2 X 500	65	1013	25,7	16,6	1,6	2,5	1,6	0,9
Carvão Betuminoso	1 X 200	65	1508	44,6	32,6	2,1	2,9	2,2	0,7
Ciclo Combinado-PFBC[3]	1 X 250	65	1486	65,2	42,4	4,0	4,4	2,9	1,5
Carvão Betuminoso	1 X 500	65	1291	53,2	34,4	3,3	4,1	2,7	1,5
Ciclo Combinado	1 X 500	65	1359	47,1	30,6	2,9	3,5	2,3	1,3
Gasificação de carvão	1 X 500	65	1428	50,5	32,8	3,1	3,5	2,3	1,2
Ciclo a Vapor	2 X 500	30	591	13,6	04,1	3,6	2,3	0,7	1,6
Óleo Combustível	2 X 500	30	687	16,5	04,9	4,4	2,4	0,7	1,7
Ciclo Combinado	1 X 220	30	447	10,5	06,6	1,5	2,4	1,5	0,9
Convencional	1 X 220	30	527	13,2	08,2	1,9	2,5	1,6	0,9
Ciclo Combinado	1 X 390	30	420	10,5	06,6	1,5	2,5	1,6	0,9
Avançado	1 X 390	30	500	13,2	08,2	1,9	2,6	1,6	1,0
Ciclo a Gás	1 X 75	10	269	03,9	00,4	4,0	1,5	0,1	1,3
Convencional	1 X 75	10	296	04,5	00,5	4,6	1,5	0,2	1,3
Ciclo a Gás	1 X 130	10	248	03,9	00,4	4,0	1,6	0,2	1,4
Avançado	1 X 130	10	274	04,5	00,5	4,6	1,7	0,2	1,5

NOTAS: **1. FGD,** "Flue Gas Desulfurization", sistema de desulforização dos gases de escape.
2. AFBC, "Atmospheric Fluidized Bed Combustion", combustão em leito fluidizado a pressão atmosférica.
3. PFBC, "Pressurized Fluidized Bed Combustion", combustão em leito fluidizado, pressurizado.
4. Valores em dólares americanos, para dezembro de 1984.

Tabela 3 - Valores recomendados de custos anuais de O&M e manutenção, em percentual do custo total de capital (CTC)

TECNOLOGIA	FC	O&M/CTC			Manutenção/CTC		
		T	F	V	T	F	V
	%		%			%	
Ciclo a Vapor, Carvão	65	3,0	1,5	1,5	2,0	1,0	1,0
Ciclo a Vapor, Óleo Combustível	30	2,2	0,7	1,5	1,5	0,5	1,0
Ciclo Combinado, Leito Fluidizado	65	4,5	2,3	2,2	3,0	1,5	1,5
Ciclo Combinado, Gasificação de Carvão	65	3,0	1,5	1,5	2,0	1,0	1,0
Ciclo Combinado, Convencional	30	2,2	1,5	0,7	1,5	1,0	0,5
Ciclo a Gás, Convencional	10	1,5	0,2	1,3	1,0	0,1	0,9

Os custos de O&M variáveis, para as usinas de base, podem ser considerados como equivalente aos custos de manutenção variável. Para as demais usinas (intermediária e pico), pode-se considerar a divisão dos custos de manutenção em fixos e variáveis proporcionalmente a divisão dos custos de O&M. Utilizando-se estas duas últimas considerações acerca da distribuição dos custos entre fixos e variáveis, foi elaborada a Tabela 3, já com os resultados sintetizados.

Custo de Manutenção de Sistemas e Equipamentos

Considerando que existe uma proporcionalidade entre os custos de manutenção e o custo total de capital da planta, se adota também um critério similar para distribuir os custos de manutenção entre os componentes da usina. Deste modo, equipamentos mais caros deverão igualmente ser mais custosos para manter em operação. Certamente que esta hipótese é bastante forte, mas pode ser substituida por um detalhado estudo de custos, desde que disponível. Considera-se apenas os custos de capital daqueles equipamentos e sistemas que exigem manutenção com custo significativo, aos quais se fará corresponder os custos de manutenção de toda a planta.

Na falta de dados sobre os custos de capital da usina, pode-se recorrer à literatura, como em (Li, 1985), conforme apresenta Tabela 4. É importante salientar que deve-se recalcular a distribuição considerando apenas os componentes que sofrem manutenções significativas.

Tabela 4 - Porcentagem do CTC (Li, 1985)

POT.UNITÁRIA (MW)	50	250	1000
CUSTO TOTAL ($/kW)	950	1150	1050
Estruturas (%)	25	20	18
Geração de Vapor (%)	22	24	26
Turbogerador (%)	20	23	25
Auxiliares (%)	09	12	14
Equipamentos Elétricos (%)	12	11	10
Equip. de Controle(%)	06	05	03
Outros (%)	06	05	04
Total (%)	100	100	100

APLICAÇÃO DA ANÁLISE TERMOECONÔMICA

Permitindo a análise, otimização e síntese de sistemas energéticos, o Método Termoeconômico (Valero et alli, 1986) tem sido crescentemente utilizado, especialmente em centrais termelétricas de diversas configurações. Tal método corresponde a uma sistematização unificadora das diversas metodologias baseadas na Segunda Lei da Termodinâmica e permite a adequada determinação das perdas evitáveis e de seus efeitos a montante e a jusante nos processos energéticos, mediante o emprego da exergia como fator ponderador dos

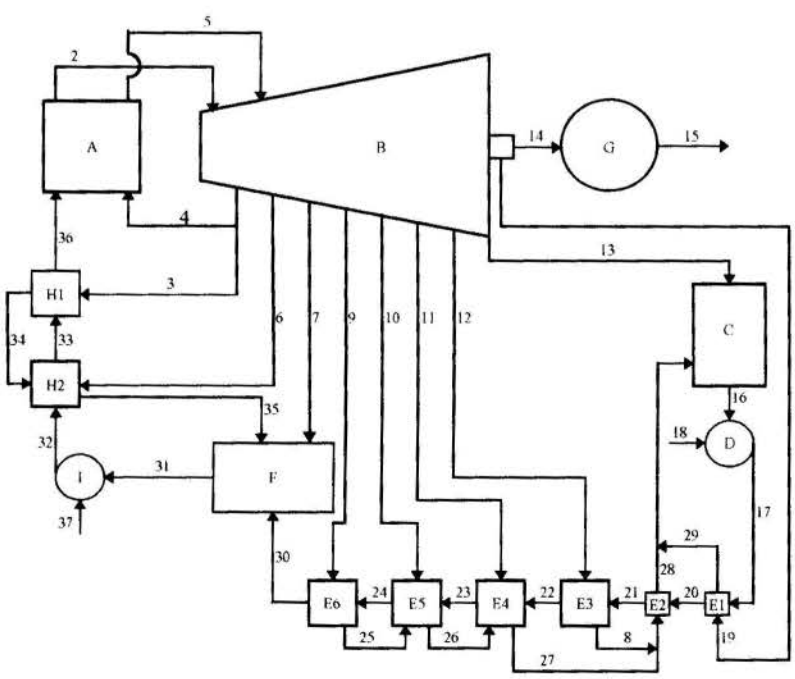


Figura 1 - Diagrama funcional da central

diversos fluxos envolvidos e da atribuição às irreversibilidades como origem das ineficiências. Visando desenvolver a análise termoeconômica associada aos custos de manutenção, será apresentado uma aplicação da metodologia. Trata-se de uma Central a Vapor de 350 MW, ainda em fase de projeto, a qual possivelmente virá a contribuir na geração de energia da CESP - Companhia Energética de São Paulo, como usina de base em regime de complementação térmica. A central utilizaria como combustível principal, os óleos ultraviscosos produzidos, como óleos residuais, na refinaria de petróleo de Paulínia (REPLAN). De uma forma simplificada, o diagrama funcional desta central é apresentado pela Figura 1.

Conhecidas as propriedades termodinâmicas nos pontos relevantes, foram aplicadas as regras usuais do Método Termoeconômico, obtendo-se a matriz de incidência expandida (**A**) e o vetor de valorização externa (**Y***). A solução do correspondente sistema linear permitiu obter os custos exergéticos unitários para os diversos fluxos, bem como para os insumos e produtos associados a cada equipamento, apresentados na Tabela 5.

Deve-se observar que o custo exergético unitário do produto (k_P) do condensador apresenta valores bem superiores aos dos demais fluxos, isto se deve, ao baixo valor exergético do produto deste equipamento em contrapartida ao custo exergético que recebe devido as irreversibilidades da planta. Na verdade, a estrutura lógica tal como definida para esta aplicação concentra os efeitos de irreversibilidades factíveis do processo no condensador, o que é questionável, pois o rendimento de um equipamento dissipativo não pode ser analisado da mesma forma que para outros equipamentos, em função da própria diferenciação, em termos exergéticos, entre os objetivo de produção. É importante lembrar que custo exergético unitário de um fluxo representa a relação entre o fluxo exergético que se teria no caso de todos os processos serem reversíveis, e portanto sem perdas exergéticas, e o fluxo exergético que efetivamente se observa, permitindo estabelecer a repercussão das irreversibilidades sobre o sistema.

Para aplicar neste exemplo os aspectos de custo de capital, O&M e manutenção, considerou-se um investimento global na planta de US$350 milhões, cuja a amortização anual é de 11,72 % deste valor e o custo anual de O&M é de 4,75% do mesmo valor. Distribuindo-se entre os diversos equipamentos os custos de amortização e O&M da planta, de modo proporcional aos seus custos, e admitindo um fator de capacidade de 50 % e uma taxa de desconto anual de 10%, pode-se obter os custos equivalentes de amortização e de O&M de cada equipamento por segundo de operação.

O novo sistema que se deseja analisar, agora termoeconômico, continua constituído pela mesma estrutura lógica utilizada para a análise puramente termodinâmica, e portanto a matriz de incidência expandida será mantida. Contudo, torna-se necessário valorizar os fluxos de entrada e saída do sistema em termos monetários, considerando-se o custo de energia elétrica e dos resíduos ultraviscosos, respectivamente como 16,0 US$/GJ e 60 US$/ton, além dos custos associados a amortização e O&M. Com a resolução do sistema $\mathbf{I}=\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}\mathbf{Z}$, obtém-se o custo exergoeconômico em (US$/s) para todos os fluxos pertencentes a central e a partir da definição insumo-produto, pode-se avaliar individualmente cada equipamento, conforme resume a Tabela 6.

ANÁLISE TERMOECONÔMICA DA MANUTENÇÃO

Neste tópico busca-se associar a análise anterior aos custos de manutenção, cujas atividades preocupam-se basicamente com o desempenho e a confiabilidade dos sistemas, contexto no qual é oportuno determinar o importância relativa das perdas exergéticas. Para uma central termelétrica é possível identificar a irreversibilidade de cada equipamento (I=F-P), que contudo não corresponde à real economia exergética possível de se efetuar, em função de restrições técnicas e econômicas. Em geral o que se pode considerar é uma otimização tendo como referência as condições de projeto, e neste caso a máxima economia exergética seria dada por:

$$I_t = I - I_p \tag{1}$$

O termo I_P pode ser denominado irreversibilidade intrínseca (Kotas, 1985), correspondendo a perda existente, no caso da planta estar trabalhando nas condições de projeto e com a mesma produção. Desta forma, o valor de I_t representa o consumo exergético adicional de insumos da planta, relativamente as condições de projeto da mesma. Assim, a irreversibilidade total é formada pela soma das irreversibilidades locais dos equipamentos:

$$I_{t,T} = \sum_{i=1}^{n} I_{t,i} \tag{2}$$

Pode-se demonstrar (Valero et al., 1994), que para cada equipamento a irreversibilidade adicional devida ao funcionamento fora das condições de projeto é dada por:

$$I_{t,i} = P_i \Delta k_i + (k_i - 1)\Delta P_i \tag{3}$$

Tabela 5 - Definição dos fluxos insumos, produtos, custos exergéticos unitários e rendimentos exergéticos dos equipamentos.

Equação	Insumo	F(kW)	F*(kW)	K_F	Produto	P(kW)	P*(kW)	K_P	η(%)
A	1	886559	886559	1,00	2-36+5-4	420267	886559	2,11	0,474
B	2+5-3-4-6-7-9-10-11-12-13-19	389851	896859	2,30	14	351962	896859	2,55	0,903
C	13+28+29	26036	59585	2,29	16	636	59585	93,64	0,024
D	18	2300	2300	1,00	17-16	1403	2300	1,64	0,610
E1	19-29	38	87	2,29	20-17	16	87	5,61	0,408
E2	8+27-28	387	885	2,29	21-20	172	885	5,15	0,445
E3	12-8	2099	4804	2,29	22-21	1286	4804	3,74	0,613
E4	11+26-27	4552	10417	2,29	23-22	3217	10417	3,24	0,707
E5	10+25-26	5600	12815	2,29	24-23	4505	12815	2,84	0,805
E6	9-25	11417	26129	2,29	30-24	9623	26129	2,72	0,843
F	7+30+35	39388	159492	4,05	31	37985	159492	4,20	0,964
G	14	351962	896859	2,55	15	344923	896859	2,60	0,980
H1	6+34-35	10728	24678	2,30	33-32	9421	24678	2,62	0,878
H2	3-34	21178	49370	2,33	36-33	19469	49370	2,54	0,919
I	37	8000	8000	1,00	32-31	3273	8000	2,44	0,409

Tabela 6 - Custos de amortização e O&M em (US$/s), custos exergoeconômicos e unitários para os insumos e produtos.

Equação	Amortização	O&M	II_F (US$/s)	c_F (US$/kJ)	II_P (US$/s)	c_P (US$/kJ)
A	1,790	0,726	1,352	1,525	3,868	9,203
B	0,344	0,140	4,598	11,794	5,082	14,439
C	0,167	0,068	0,303	11,632	0,537	844,617
D	0,007	0,003	0,037	16,000	0,046	33,050
E1	0,001	0,000	0,000	11,632	0,002	102,522
E2	0,004	0,002	0,004	11,632	0,010	59,616
E3	0,028	0,011	0,024	11,632	0,064	49,985
E4	0,057	0,023	0,053	11,632	0,133	41,477
E5	0,017	0,007	0,065	11,632	0,089	19,648
E6	0,014	0,006	0,133	11,632	0,153	15,912
F	0,028	0,011	1,251	31,770	1,290	33,963
G	0,190	0,077	5,082	14,439	5,349	15,509
H1	0,006	0,003	0,127	11,793	0,135	14,364
H2	0,025	0,010	0,259	12,210	0,293	15,073
I	0,048	0,020	0,128	16,000	0,196	59,843

Na expressão anterior, o primeiro termo fornece a parcela da irreversibilidade que tem origem na perda de eficiência do equipamento em questão, se tratando portanto de uma *irreversibilidade endógena*, que poderá ser corrigida atuando-se diretamente sobre o equipamento. O segundo termo fornece a parcela adicional de irreversibilidade que surge no equipamento devido a perda de eficiência de outros equipamentos da instalação, fazendo com que este tenha de gerar maior quantidade de produto. É portanto uma *irreversiblidade estrutural ou exógena* que se pode evitar somente atuando sobre o resto da planta. Pode-se mostrar também que, para pequenas alterações, a economia exergética obtida em trazer determinado equipamento para as condições de projeto é dada por:

$$A_{t,i} = k^{*}_{F,i} \cdot P_i \cdot \Delta k_i \qquad (4)$$

Da mesma forma, a economia monetária obtida em se trazer o mesmo equipamento para as condições de projeto é dada por:

$$E_{t,i} = c_{F,i} \cdot P_i \cdot \Delta k_i \qquad (5)$$

Considerando as condições de operação da central selecionada, uma análise interessante é a avaliação da sensibilidade do custo adicional frente à variações do desempenho dos equipamentos. Para tal, será admitida uma variação no inverso da eficiência do equipamento de 0,5% ($\Delta k/k$ = 0,5%) e calculado o custo adicional relativo. Desta forma tem-se:

$$E_{t,i} = II_{F,i} \cdot \left(\frac{\Delta k}{k}\right)_i \qquad (6)$$

Neste caso se obtém para cada equipamento da central apresentada no item anterior, os seguintes consumos exergéticos ($A_{t,i}$) e custos ($E_{t,i}$), adicionais, dados na Tabela 7. Estes valores correspondem ao consumo incremental de exergia e o custo associado, quando ocorre uma variação no desempenho dos equipamentos.

Os resultados revelam a maior sensibilidade termoeconômica da planta à variações de desempenho do gerador e da turbina relativamente aos demais equipamentos. Portanto, estes são os equipamentos que, em princípio, devem receber maiores investimentos de manutenção no sentido de manter as condições de operação dos mesmos próximas as de projeto. Cabe agora comparar esta sensibilidade, com os custos estimados de manutenção para cada equipamento, a fim de determinar a dimensão relativa dos custos adicionais associados à irreversibilidade. Este parâmetro foi determinado para uma variação de 0,5% do custo exergético unitário.

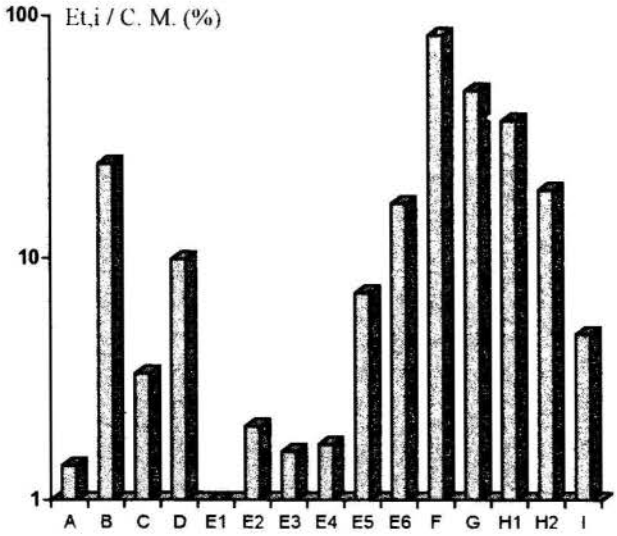
Tabela 7 - Consumo exergético e custo adicionais, para variações em k de 0,5% em cada equipamento

Equipamento	$A_{t,i}$(kW)	$E_{t,i}$(10^{-3}US$/s)
Caldeira	4432,79	6,759
Turbina	4484,29	22,989
Condensador	297,93	1,514
Bomba de Baixa	11,50	0,184
Reg. de Baixa 1	0,44	0,002
Reg. de Baixa 2	4,42	0,022
Reg. de Baixa 3	24,02	0,122
Reg. de Baixa 4	52,09	0,265
Reg. de Baixa 5	64,08	0,326
Reg. de Baixa 6	130,65	0,664
Reg. de Mistura	797,46	6,257
Gerador	4484,29	25,410
Reg. de Alta 1	123,39	0,633
Reg. de Alta 2	246,85	1,293
Bomba de Alta	40,00	0,640

Tabela 8 - Custos de manutenção e sua relação com os custos adicionais devidos à irreversibilidade

Equipamento	C. M. (10^{-3}US$/s)	Et,i / C. M. (%)
Caldeira	486,139	1,39
Turbina	93,540	24,58
Condensador	45,326	3,34
Bomba de Baixa	1,852	9,94
Reg. de Baixa 1	0,222	1,00
Reg. de Baixa 2	1,111	2,02
Reg. de Baixa 3	7,702	1,59
Reg. de Baixa 4	15,553	1,70
Reg. de Baixa 5	4,518	7,21
Reg. de Baixa 6	3,925	16,92
Reg. de Mistura	7,480	83,65
Gerador	51,695	49,15
Reg. de Alta 1	1,703	37,13
Reg. de Alta 2	6,740	19,18
Bomba de Alta	13,109	4,88

Nota: Valores do custo anual de manutenção equivalentes a 67 % do custo de O&M



A	Caldeira
B	Turbina
C	Condensador
D	Bomba de Baixa Pressão
E1	Regenerador de Baixa Pressão 1
E2	Regenerador de Baixa Pressão 2
E3	Regenerador de Baixa Pressão 3
E4	Regenerador de Baixa Pressão 4
E5	Regenerador de Baixa Pressão 5
E6	Regenerador de Baixa Pressão 6
F	Regenerador de Mistura
G	Gerador
H1	Regenerador de Alta Pressão 1
H2	Regenerador de Alta Pressão 2
I	Bomba de Alta Pressão

Figura 2 - Custos adicionais associados às irreversibilidades como percentual dos custos de manutenção praticados ($E_{t,i}$/C.M.)

Analisando os resultados, verifica-se que a magnitude dos custos adicionais para uma variação de k em 0,5%, é relevante frente aos custos de manutenção praticados para os equipamentos, indicando, de certa forma, a importância do monitoramento do seus desempenhos. Por exemplo, na turbina os custos associados à perda de rendimento podem representar cerca de 25% dos custos da manutenção neste equipamento. Para o regenerador de mistura, apesar dos custos adicionais associados à perda de desempenho não serem os mais elevados comparativamente aos demais equipamentos, o percentual relativo aos custos de manutenção praticados (Et,i / C. M.) é o mais elevado relativamente aos outros equipamentos, indicando que a parcela relativa dos custos de manutenção a ser empregada no sentido de manter o desempenho deste equipamento, deve ser maior comparativamente aos demais equipamentos, conforme indica a Tabela 8 e a Figura 2.

COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES

De uma forma geral para centrais termelétricas, os critérios utilizados para definir freqüência e intensidade das atividades de manutenção são predominantemente de disponibilidade e confiabilidade. A aplicação da metodologia apresentada em uma planta em operação, que disponha de um histórico suficientemente detalhado do desempenho dos equipamentos, sobretudo em função das ações da manutenção, com os custos relativos conhecidos, permite definir limites ideais de desempenho dos equipamentos, a partir dos quais uma intervenção no mesmo seja economicamente viável, permitindo agregar uma visão exergética ao planejamento da manutenção. Neste sentido a Análise Termoeconômica pode constituir uma ferramenta de efetivo interesse prático, uma vez que possibilita a racional valorização e distribuição das perdas nas centrais termelétricas.

REFERÊNCIAS

ENERCONSULT, Centrais Termelétricas a Resíduos de Refinarias de Petróleo, Estudo de Viabilidade Técnico-Econômico, São Paulo, 1988

EPRI, Technical Assessment Guide, vol. 1 - Electricity Supply, Palo Alto, California, 1986

EPRI, Conceptual Design of a Gulf Coast Lignite - Fired Atmospheric Fluidzed Bed Power Plant, Woodbury, New York, 1979

Kotas, T. J., The Exergy Method of Thermal Plant Analysis, Butterworths, London, 1985

Li, K.W. & Priddy, A.P., Power Plant System Design, John Wiley, New York, 1985

Rodríguez, M.A., Criterios de Diseño de Plantas Termoelétricas, Ed. Limusa, México, 1981

Roser, G. (ABB), "Fixed Cost Operations and Maintenance for IPP CC", *Turbomachinery International*, v 35, mar-apr 1993.

Stoll, H.G., Least-Coast Eletric Utility Planning, Wiley-Interscience, New York, 1989

TVA, "The Kingston Steam Plant", TR N° 34, Tennesse, USA - 1965

Valero, A., Lozano, M.A., Muñoz, M, "A General Theory of Exergy Saving: Part I. On the Exergetic Cost, Part II. On the Thermoeconomic, Part III. Energy Saving and Thermoeconomics", in Computer-Aided Engineering of Energy Systems, Vol.3- Second Law Analysis and Modelling, R.A.Gaggioli,ed., ASME, New York, 1986

Valero, A. ; Lozano,M.A., Curso de Termoeconomia, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1994

ABSTRACT

After a brief review of thermal power plants maintenance costs, this paper presents an application of the Thermoeconomic Method on a 350 MW steam power plant, evaluating the influence of irreversibilities at equipment level, aiming to determine their significance in overall maintenance cost. This approach allows to associate plant performance optimisation to maintenance planning, usually done based only on reliability concept. For instance, at the analysed plant, the loss of performance costs in some feed-heaters could be at the same order of magnitude than the maintenance cost of these equipment.

INFLUÊNCIAS DE PARÂMETROS DE ATOMIZAÇÃO NA COMBUSTÃO DE SPRAYS EM COMBUSTORES TIPO TUBO DE RIJKE

Pedro Teixeira Lacava e João Andrade de Carvalho Jr.
Laboratório Associado de Combustão e Propulsão
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais
12630-000, Cachoeira Paulista, SP, Brasil

Mardson Queiroz McQuay
Mechanical Engineering Department
Bringham Young University, 242 CB
84602-4102, Provo, Utah, USA

Resumo

O objetivo do presente trabalho foi investigar a influência de parâmetros de atomização na geração de instabilidades acústicas na combustão de sprays em tubos de Rijke. Para isso, dois tipos de atomizadores foram utilizados: Y e cone sólido. O primeiro foi projetado especialmente para este trabalho e o segundo foi adquirido junto a um fornecedor comercial. Ambos atomizadores foram caracterizados, para levantamento dos diâmetros médios de seus sprays, com sistema laser PDPA ("Phase Doppler Particle Analyzer"). Foram determinadas as regiões de operação dos atomizadores, onde oscilações foram geradas no combustor. Com o atomizador tipo Y, as oscilações não apresentaram uma estrutura definida, com as amplitudes bastante variáveis e sem nenhum controle. Com o atomizador tipo cone sólido, regiões de operação foram determinadas para as quais fortes oscilações ocorriam no combustor. Os diâmetros médios correspondentes a essas regiões foram também determinados. Os resultados obtidos não apontaram o diâmetro médio do spray como sendo o único fator responsável pela geração de instabilidades ácusticas. Observou-se a influência de novos parâmetros na combustão de sprays em câmaras de combustão pulsante, tais como: a concentração de gotas e o ângulo de abertura do spray.

INTRODUÇÃO

Rijke, em 1859, notou que fortes oscilações acústicas eram excitadas quando uma tela metálica aquecida era colocada na metade inferior de um tubo vertical aberto em ambas extremidades (Dowling e Williams, 1983). Tal fenômeno possibilitou o desenvolvimento de combustores pulsantes do tipo tubo de Rijke, que aproveitam este fenômeno na geração de energia obtendo diversas vantagens, tais como: economia de combustível, formação reduzida de poluentes e escória, aumentos nas taxas de transferência de calor convectiva e investimento de capital reduzido quando comparado com técnicas convecionais (Carvalho et al., 1987).

Uma análise teórica que mostra as condições necessárias para excitação de máximos de amplitude de pressão em um tubo Rijke foi realizada por Carvalho et al. (1989). Esta análise mostra que a localização de um aquecedor plano para produzir a máxima intensificação das oscilações do primeiro harmônico é L/4, onde L é o comprimento do tubo. Em combustores pulsantes do tipo Rijke, a grade metálica do tubo de Rijke original é substituida por um leito de combustão no caso de combustíveis sólidos, por um atomizador no caso de combustíveis líquidos ou por um distribuidor de gás no caso de combustíveis gasosos.

Apesar da combustão pulsante ser um fenomeno bastante conhecido, os mecanismos que levam a geração de oscilações ainda não foram suficientemente depurados, requerendo a atenção de investigações nesta direção. Couto (1989), investigando a queima de liquido sobre a forma atomizada em um combustor pulsante tipo Rijke, apontou uma possivel influência do tamanho das gotas na geração de instabilidades acústicas. Desta forma o presente trabalho apresenta os resultados de uma investigação experimental da queima de álcool etílico em sprays gerados por um injetor tipo Y e por um injetor tipo cone sólido em um combustor tipo tubo de Rijke.

ARRANJO EXPERIMENTAL

Combustor Pulsante. A Figura 1 apresenta o combustor pulsante experimental do tipo tubo de Rijke, com 0,20 m de diâmetro interno, construído em aço 1020 de forma modular, utilizado neste estudo. Os módulos tem altura variável , sendo que vários deles são encamisados para refrigeração das paredes do combustor. São possíveis montagens de 2,4 , 2,8 e 3,2 m de altura, sobre uma câmara de desacoplamento. A finalidade desta câmara é simular as condições de tubo aberto em ambas extremidades e permitir que a alimentação de ar seja controlada.

Na parede do combustor foram fixados três termopares chromel-alumel tipo K, bitola 1,5 mm, de isolação mineral e junta isolada, para medidas de temperatura dos gases dentro do tubo nas seguintes posições: 25 (T_1), 150 (T_2) e 308 cm (T_3) acima da base do tubo (logo abaixo da chama, próximo ao centro do tubo e próximo a saida dos gases, respectivamente). Os termopares foram ligados a um sistema de aquisição de dados HP 6954 (constituído de um computador HP 9000 série 300 e de um multiprogramador com placas de aquisição) que fornece a leitura das temperaturas medidas por meio de cabos de extensão sem compensação térmica, pois o aparelho possui compensação elétrica interna. As amplitudes de oscilação acústica foram monitoradas por transdutores de pressão piezoelétricos, marca Kistler, modelo 7261, sendo um deles posicionado na seção média do tubo 160 cm (P_2), ou seja, na posição onde a amplitude de pressão acústica do modo fundamental de oscilação é máxima. Os demais transdutores foram posicionados a 15 (P_1) e 80 cm (P_3) acima da base do tubo.

Os trandutores de pressão foram ligados cada um a um amplificador de carga , marca Kistler, modelo 5006 , e ao osciloscópio analógico, marca Tektronix, modelo 7633, para visualização em tempo real das amplitudes e frequências das pressões acústicas. O sistema de coleta dos dados para aquisição dos valores de pressão foi ligado em paralelo ao

osciloscópio. Também em paralelo, um sitema de aquisição de dados secundário HP 3421A para coleta dos dados de frequência foi utilizado.

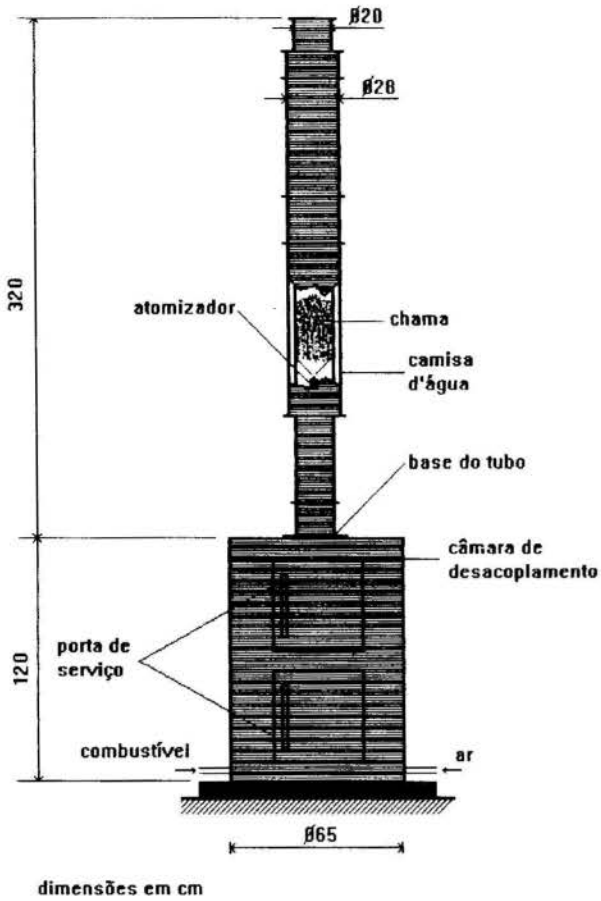


Figura 1 - Combustor pulsante tipo Rijke desenvolvido no INPE.

Atomizadores. Nesta investigação utilizou-se dois tipos diferentes de atomizadores para obter condições de combustão diferenciadas. Tanto o atomizador tipo Y, especialmente projetado para esta investigação, como o cone sólido, obtido junto a um representante comercial, funcionam sob o princípio de se imprimir um fluido com alta velocidade (no presente caso o ar) sobre o fluido a ser atomizado (álcool), que possui baixa velocidade.

O projeto do atomizador tipo Y foi baseado na investigação experimental realizada por Mullinger e Chigier (1974) e fazendo algumas hipóteses aos escoamentos de ar e combustível (Lacava et al., 1995). O esquema e as dimensões do atomizador Y estão apresentados na Figura 2. O diâmetro médio das gotas do spray formado pelo atomizador tipo Y pode ser estimado pela equação apontada por Wigg (1964), que calcula o diâmetro mediano de massa (MMD) para este tipo de atomizador (equação 1). O MMD pode ser convertido para SMD ("Sauter Mean Diameter") através da relação MMD/SMD igual a 1,2 , para um erro de 5%, conforme apresentado por Simmons (1977).

$$MMD = \frac{200.\,\delta^{0,5} m_f^{0,1}\left(m_f + \frac{m_f}{m_a}\right)^{0,5} h^{0,1}\tau^{0,2}}{\rho_a^{0,3}.\,V_a} \quad , \quad (1)$$

onde: δ é a viscosidade cinemática do combustível (centistokes), m_f a vazão mássica do combustível (g/s), m_a a vazão mássica do fluido de atomização (g/s), h o raio da câmara de mistura (cm), τ a tensão superficial do combustível (dynas/cm), ρ_a a densidade do fluido de atomização (g/cm^3) e V_a a velocidade de injeção do fluido de atomização (m/s).

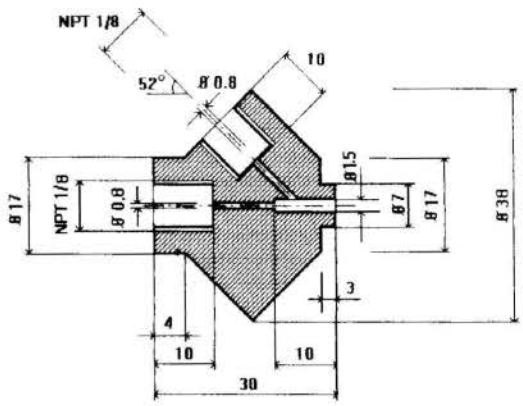


Figura 2 - Atomizador tipo Y utilizado.

O atomizador cone sólido escolhido foi marca Delavan modelo "Liquid Solid Cone"Airo 30615, seu esquema está na apresentado na Figura 3.

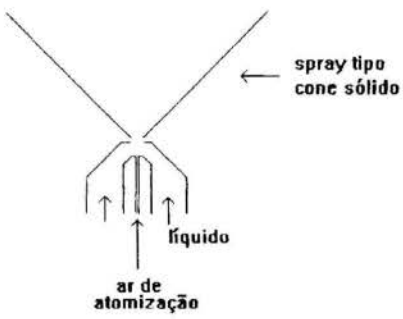


Figura 3 - Esquema de funcionamento do atomizador tipo cone sólido marca Delavan.

As vazões de combustível foram medidas com rotâmetro calibrado para álcool, e as vazões de ar de atomização e ar oxidante de combustão foram medidas com sistemas de placas de orifício.

Sistema Laser. Os sprays gerados pelo atomizadores foram caracterizados com um sistema laser PDPA (Phase Doppler Particle Analyzer). Este sistema, se utiliza, conforme mostrado na Figura 4, do volume formado pela intersecção entre dois raios laser para realizar medidas tanto de velocidade como tamanho de partículas. Quando uma partícula passa pelo volume, ela espalha luz criando uma estrutura de franjas de interferência. Uma lente receptora projeta uma porção desta estrutura em vários detetores. Cada detetor produz um sinal tipo Doppler, sendo a diferença de fase entre os dois sinais Doppler de dois detetores diferentes proporcional ao tamanho da partícula.

Por facilidade de operação, a caracterização dos sprays de ambos atomizadores foi feita com ar e água como fluido de trabalho. Para o atomizador tipo Y os resultados foram convertidos para álcool utilizando a metodologia proposta por Johson (1982). Obteve-se que o SMD do álcool é igual ao SMD

da água obtido na caracterização vezes 0,969 (para vazões de iguais de álcool e água). Já para o atomizador tipo cone sólido o SMD para vazões de álcool foi considerado igual ao da água (baseado na conversão feita para o atomizador tipo Y).

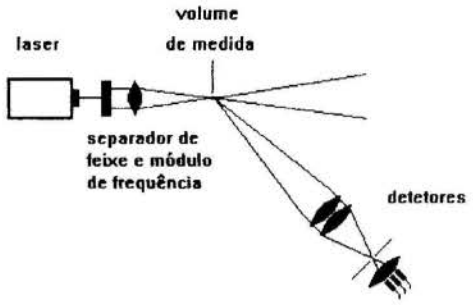


Figura 4 - Esquema do sistema de medida PDPA.

Equipamentos Auxiliares. No presente trabalho, alguns equipamentos auxiliares foram utilizados para reduzir o comprimento de chama e/ou facilitar a geração de oscilações, conforme investigações realizadas por Couto (1989), Momma (1993) e Ferreira (1988). Desta forma, utizou-se três tipos diferentes de telas metálicas: fina, 53% de área aberta, 0,23 mm de diâmetro do fio e 0,62 mm de abertura de malha; média, com 60% de área aberta, 1,2 mm de diâmetro do fio e 2,2 mm de abertura; grossa, com 70% de área aberta e furos com 5mm de diâmetro. Ainda utilizou-se un cone de retenção com passagens axiais e um "swirler"axial com ângulo entre pás de 36°. Os dispositivos foram posicionados abaixo dos atomizadores, sem prejudicar a formação dos sprays, acoplados a um sistema semelhante a um telescópio que permite variar a posição dos atomizadores dentro do tubo.

TESTES E RESULTADOS

Os ensaios foram executados com o objetivo de determinar as regiões onde ocorre a geração de instabilidades acústicas. Tais regiões são caracterizadas pela vazão de combustível, vazão de ar de atomização, vazão de ar de combustão, posição do atomizador no interior do tubo e características do spray (tamanho das gotas, ângulo de abertura, etc.).

Atomizador Tipo Y. Na montagem em que utilizou-se apenas o atomizador tipo Y, sem qualquer equipamento auxiliar, a geração de instabilidades acústicas não foi observada. Este resultado negativo provavelmente ocorreu em virtude do longo comprimento de chama obtido pelo atomizador. Apesar de promover um fino spray, o ângulo de abertura é pequeno, prejudicando a penetração de ar oxidante e de calor.

Nos ensaios com a montagem tela fina mais atomizador tipo Y surgiram os primeiros resultados de geração de oscilação. O formato da onda de pressão acústica era bem definido, mas com forte variação na amplitude de oscilação. Apesar desta variação na amplitude, a onda de pressão apresentou uma estrutura definida, ao contrário do caso com apenas o atomizador tipo Y, obtendo-se repetibilidade dos pontos de oscilação. Tais oscilações foram obtidas posicionado o atomizador a 32 cm da boca do tubo.

A Figura 5 apresenta uma curva que represnta o compromisso entre a vazão de álcool e ar de atomização para o surgimento das oscilações em uma vazão fixa de ar de combustão de 15,65 g/s. Outros testes foram realizados modificando a vazão de ar de combustão para diversas vazões de álcool e ar de atomização. Desta forma, observou-se que a instabilidade acústica, para esta montagem é extremamente sensível a vazão do ar de combustão. Assim, as oscilações só surgiram com vazões de ar oxidante próximas a 15,65 g/s.

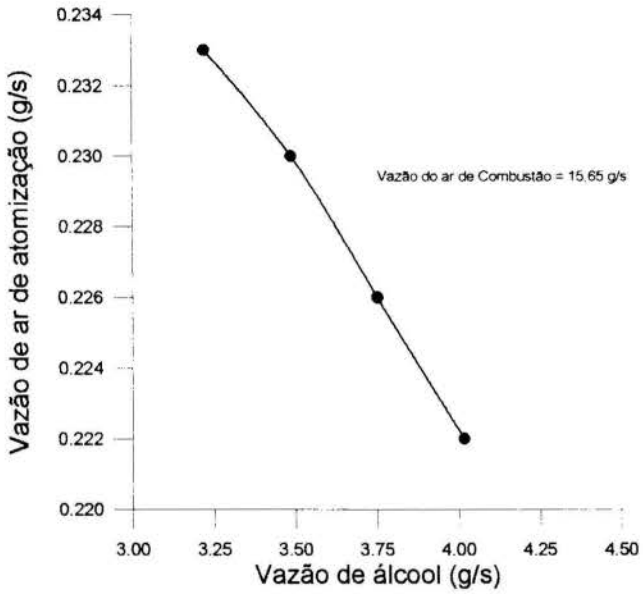


Figura 5 - Curva de oscilação para a vazão de ar de combustão igual 15,65 g/s.

Uma conclusão sobre o comportamento da amplitude, através da curva de oscilação apresentada na Figura 5, fica bastante comprometida devido ao comportamento aleatório desta. Isto pode ser observado na Figura 6. No entanto, observou-se que, apesar das alterações das vazões e variação da amplitude, a frequência de oscilação manteve-se em 67 Hz.

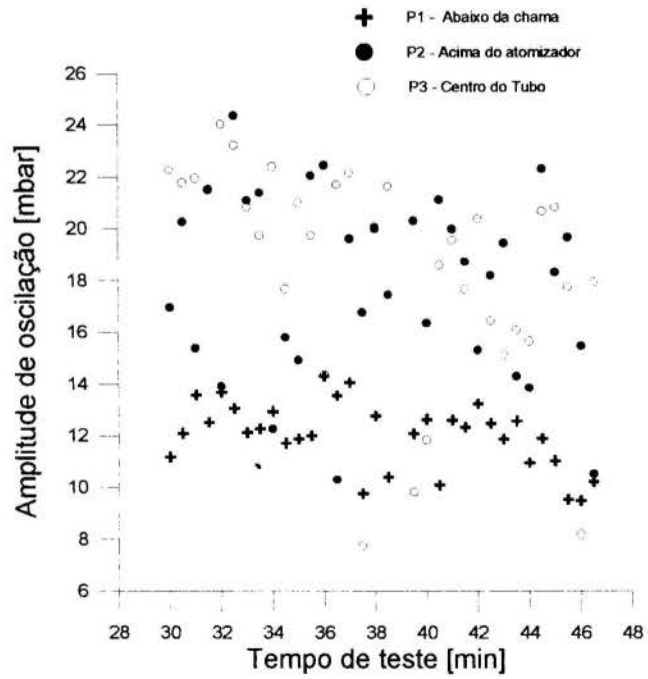


Figura 6 - Comportamento da amplitude de oscilação para o ponto da curva de oscilação (Figura 5) onde a vazão de álcool é 3,75 g/s e a vazão de ar de atomização é 0,226 g/s.

A Figura 7 apresenta o resultado da caracterização experimental do atomizador tipo Y na região de oscilação, utilizando o sistema PDPA. Além disso, a figura também apresenta o resultado do cálculo do diâmetro médio do spray utilizando a equação de Wigg, com valor da velocidade do ar de atomização calculada teoricamente e estimada experimentalmente. Percebe-se, tanto pela caracterização como teoricamente, que a medida que aumenta-se a vazão de combustível também aumenta o SMD do spray, o que era de se esperar devido as características de funcionamento do atomizador Y.

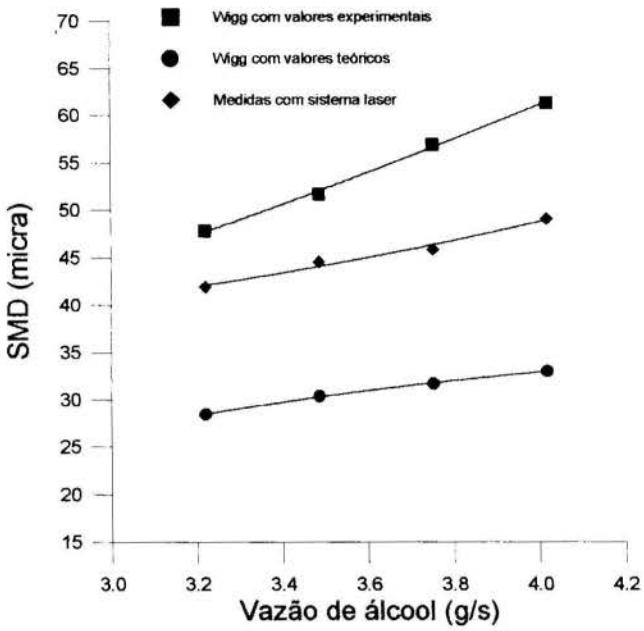


Figura 7 - SMD's calculados pela equação de Wigg com valores teóricos e experimentais para a velocidade do ar de atomização, e medidas feitas pelo sistema laser PDPA, para região de oscilação do atomizador tipo Y.

Os testes do atomizador tipo Y realizados com as telas metálicas média e grossa, cone de retenção e swirler não apresentaram resultados positivos. Apesar do ancoramento da chama nas proximidades do bico atomizador, vórtices com dimensões consideráveis e uma zona de recirculação forte podem ser fatores de amortecimento das oscilações.

Atomizador Cone Sólido. A Figura 8 e Tabela 1 mostram as regiões onde se obteve o acoplamento do primeiro harmônico, sendo que tais regiões foram encontradas posicionando o atomizador a 37 cm acima da base do tubo e utilizando a tela fina como equipamento auxiliar. As frequências, nas três posições medidas, foram 73 Hz para todas condições da Tabela 1. Os valores da amplitude de oscilação acústica, apresentados na Tabela 1 (P_1, P_2 e P_3), são valores médios pois, durante a realização dos testes observou-se que há uma flutuação das amplitudes, apesar da onda de pressão acústica ter um formato senoidal bem definido. Contudo, também observou-se que a flutuação da amplitude pode ser atenuada com o aumento da vazão de ar de combustão. Adicionalmente, a pressão acústica aumenta com o aumento da vazão do ar de combustão. Esses dois fatos ocorrem pela diminuição do comprimento de chama com o incremento da vazão de oxidante, concentrando a troca de calor nas regiões mais próximas à metade inferior do tubo. Desta maneira as amplitudes crescem até um valor limite, a partir do qual ocorre uma perda de calor da chama para o excesso de ar.

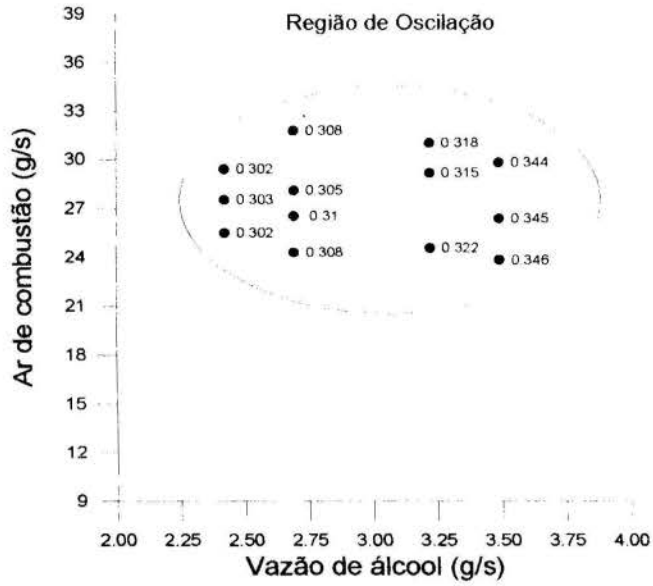


Figura 8 - Região de oscilação para o atomizador tipo cone sólido onde obteve-se o acoplamento do primeiro harmônico (os números ao lado de cada ponto representam o valor do ar de atomização g/s).

O comportamento da amplitude de oscilação com o decorrer do tempo de teste também foi investigado. A Figura 9 apresenta como variaram as amplitudes de pressão acústica P_1, P_2 e P_3, para a condição 5 da Tabela 1. As pressões parecem variar em torno de um valor médio que diminui com o passar do tempo do teste. Apesar deste comportamento, as temperaturas medidas ao longo do tubo não tiveram grandes variações, como mostra a Figura 10. Para os demais pontos da Tabela 1 um comportamento semalhante foi observado, mesmo quando o tempo máximo de operação que a montagem permitiu foi utilizado (cerca de 140 minutos).

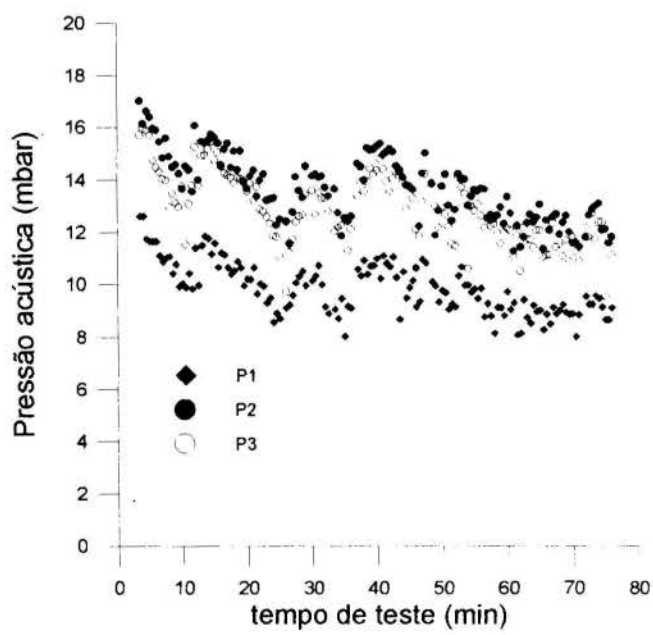


Figura 9 - Comportamento das pressões acústicas com o passar do tempo de teste (condição 5 da Tabela 1).

TABELA 1 - Região de oscilação para o Atomizador Tipo Cone Sólido.

n°	m_f (g/s)	m_{comb} (g/s)	m_{atm} (g/s)	r_1	T_1 (C°)	T_2 (C°)	T_3 (C°)	P_1 (mbar)	P_2 (mbar)	P_3 (mbar)
1	2,42	25,51	0,302	10,5	24,5	802	584	9,40	12,72	12,42
2	2,42	27,53	0,303	11,4	25	793	589	10,62	14,70	14,42
3	2,42	29,41	0,302	12,1	25	770	590	11,94	16,42	16,20
4	2,69	24,30	0,308	9,0	41	879	687	8,30	10,67	11,07
5	2,69	26,52	0,310	9,9	42	868	688	9,51	13,38	13,08
6	2,69	28,10	0,305	10,4	42	858	692	10,87	15,39	15,08
7	2,69	31,77	0,308	11,9	44	830	689	12,09	17,15	16,76
8	3,22	24,57	0,322	7,6	38	890	717	9,43	13,00	12,39
9	3,22	29,15	0,315	9,1	41	896	729	10,88	15,00	14,48
10	3,22	31,00	0,318	9,6	39,5	877	725	12,11	16,98	16,43
11	3,49	23,82	0,346	6,7	24	856	587	8,68	12,00	11,55
12	3,49	26,36	0,345	7,6	24	865	663	11,99	14,59	15,10
13	3,49	29,79	0,344	8,5	24	860	665	12,31	16,87	16,19

Obs: m_f é a vazão de álcool, m_{comb} a vazão de ar de combustão e m_{atm} a vazão de ar de atomização.

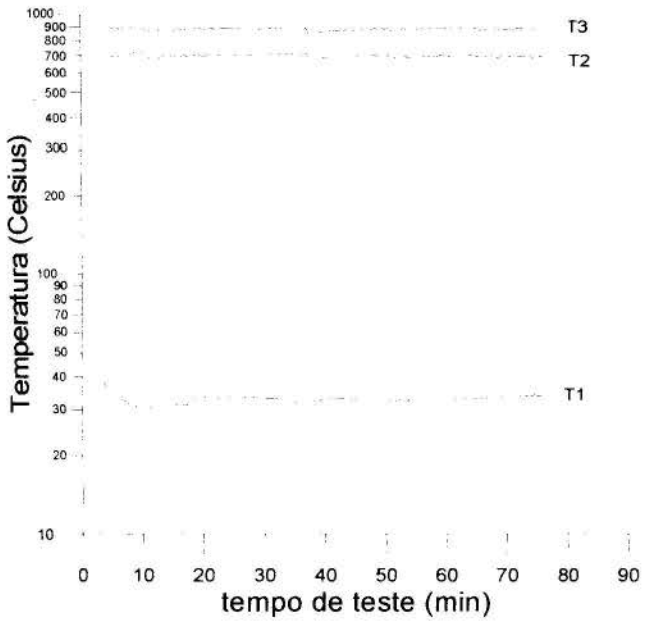


Figura 10 - Comportamento da temperatura com o passar do tempo de teste para a condição 5 da Tabela 1.

A distribuição do tamanho das gotas não varia demasiadamente dentro da região de oscilação, conforme a caracterização feita para água (Figura 11). No entanto, a geração de instabilidades acústicas é extremamente sensível à vazão do ar de atomização. Isto ocorre porque o ângulo de abertura e a forma do spray variam com esta vazão. Desta forma, as oscilações ocorrem somente onde o spray formado é capaz de promover chamas com determinadas características necessárias para o surgimento das mesmas. Por exemplo, no caso da condição 12 da Tabela 1, para a vazão de 3,49 g/s de álcool a geração de instabilidades acústicas ocorreu com uma vazão de ar de atomização de aproximadamente 0,345 g/s. Se para esta mesma vazão de álcool for colocada uma vazão de ar de atomização de 0,335 g/s, ou 0,355 g/s, não haverá oscilações acústicas, pois as condições da chama mudaram apesar da distribuição do tamanho de gotas permanecer praticamente inalterado.

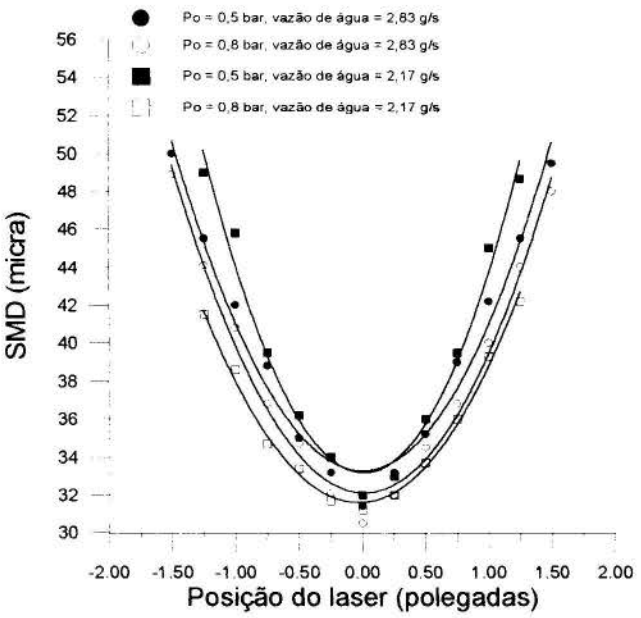


Figura 11 - Distribuição radial do SMD para o atomizador tipo cone sólido. P_0 é pressão de injeção do ar de atomização.

Os valores de r_1 (razão entre a vazão mássica de oxidante e a vazão mássica de combustível) estiveram num intervalo próximo ao valor estequiométrico (8,95). O processo de combustão ocorreu em condições próximas a estequiometria. Desta forma, a relação potência gerada e consumo de combustível é otimizada.

Tal qual para o atomizador tipo Y, teste com as telas metálicas média e grossa, cone de retenção e "swirler", também foram realizados. O resultado também não foi positivo, o que reforça a hipótese de que uma zona de recirculação forte pode ser um fator de amortecimento das oscilações.

CONCLUSÕES

A utilização de atomizadores tipo Y em combustores pulsantes tipo tubo de Rijke não apresentou resultados satisfatórios, pois além de não se obter uma montagem experimental para a qual não ocorresse variação no valor da amplitude, a razão ar de combustão/combustível foi muito baixa, cerca de 50% do valor estequiométrico. Outro problema é a sensibilidade das oscilações com a variação da vazão do ar de combustão, limitando a operação em um valor fixo. Apesar dos resultados aquém do esperado obtidos com o atomizador tipo Y, sua utilização nesta investigação foi bastante importante. Os resultados obtidos levaram à consideração de novos parâmetros na combustão de sprays em câmaras de combustão pulsantes, tais como: a concentração de gotas e o ângulo de abertura do spray.

A caracterização feita para o atomizador tipo cone sólido mostrou que a distribuição de gotas no spray é simétrica e que para as combinações de vazões de líquido e ar onde o spray tem um formato cônico, a distribuição do tamanho das gotas é praticamente igual. O ângulo de abertura do spray é bem maior do que o obtido pelo atomizador tipo Y, mudando as características da chama no interior do tubo, apesar da ordem de grandeza do diâmetro médio das gotas ser o mesmo para ambos atomizadores.

É provável que a geração de instabilidades acústicas esteja intimamente relacionada com o ângulo de abertura do spray. Portanto, o regime de combustão pulsado deve ocorrer par ângulos de abertura que propiciem um comprimento de chama tal que a maior parte da transferência de calor para o escoamento gasoso ocorra nas proximidades de L/4. O tamanho das gotas do spray é um fator fundamental para o processo de combustão pulsante, não sendo, no entanto, o único pois, além desse, a densidade de gotas e o ângulo de abertura influenciam a penetração de calor e oxidante para o interior do spray, consequentemente influenciando as características da chama.

Os resultados apresentados para o atomizador tipo cone sólido mostraram que o aumento da vazão de ar de combustão atenua a variação da amplitude de oscilação. Adicionalmente, a pressão acústica aumenta com o aumento da vazão do ar de combustão. Esses dois fatos ocorrem pela diminuição do comprimento da chama com o incremento da vazão de oxidante, concentrando a troca de calor nas regiões mais próximas à metade inferior do tubo. Desta maneira as amplitudes crescem até um valor limite, a partir do qual ocorre uma perda de calor da chama para o excesso de ar.

A queda da amplitude de oscilação com o passar do tempo de teste, pode ter ocorrido pelo fato de não se ter obtido um regime permanente de transferência de calor para as paredes do tubo. Com o passar do tempo, é possível que os gradientes de temperatura que determinam as diversas taxas de transferência de calor no equipamento diminuam. A amplitude, com o passar do tempo, deve alcançar um valor estável, sendo necessário realizar testes com tempos de duração mais prolongados do que os deste trabalho, para esta verificação. Para isso, é preciso uma montagem experimental mais complexa do que a utilizada aqui.

A presença da tela metálica fina foi fundamental para obtenção de oscilações acústicas. Com ela, obteve-se a geração de pequenos vórtices na região de reação sem produzir uma perda de carga elevada ao escoamento. A colocação de corpos rombudos, como o cone de retenção de chama, e de "swirlers", com o intuito de formar uma zona de recirculação forte a jusante do bico atomizador não parece ser uma medida razoável. Apesar da perda de carga na passagem do ar de combustão pelo "swirler" não ser alta (Muniz, 1993), a zona de recirculação forte parece amortecer as oscilações. Para comprovar esta hipótese, é necessário uma montagem no tubo de Rijke com um "swirler" que permita variar a estrutura da zona de recirculação.

REFERÊNCIAS

Carvalho Jr., J.A.; Ferreira, M.A.; Bressan, C.; Ferreira, J.L.G. Definition of water location to drime maximum amplitude acoustic oscillations in a rijke tube. Combustion and Flame, 76(1-2):17-27, 1989.

Carvalho Jr., J.A.; Miller, M.; Daniel, B.R.; Zinn, B.T. Combustion characteristics of unpulverized coal under pulsating and non-pulsating conditions. Fuel, 66(1):5-8, 1987.

Couto, H.S. Queima de combustíveis líquidos em combustores pulsantes tipo tubo de rijke. (Tese de Doutorado) - UFRJ/COPPE, Rio de Janeiro, 1989.

Dowling, A.P.; Williams, J.E.F. Sound and sources of sound. New York, John Wiley & Sons, 1983.

Ferreira, M.A. Combustão pulsante de carvão vegetal em tubo de rijke. (Dissertação de Mestrado) - UNESP/FEG, Guaratinguetá, 1988.

Johnson, S.M. Venturi nozze effects on fuel drop size and nitrogen oxide emissions. Cleveland, OH, NASA, Lewis Research Center, 1982. (Nasa TP-2028).

Lacava, P.T., Carvalho Jr, J.A., Mcquay, M.Q., Teoria e Experimentação de Um Queimador Tipo Y para Álcool, XIII Congresso Brasileiro e VII Congresso Ibero Americano de Engenharia Mecânica, 1995, Belo Horizonte, Universidade Federal de Minas Gerais, Anais, Área de Termociências/Combustão, paper no. 7, 04 páginas, 1995.

Momma, L.J. Estudo da frequência e amplitude de pressão acústica em combustores tipo tubo de rijke. (Dissertação de Mestrado) - INPE, São José dos Campos, mar. 1993. 132 p. (INPE-5534-TDI/522).

Mullinger, P.; Chigier, N.A. The design and performance of internal mixing multijet twin fluid atomizers. Journal of The Institute of Fuel, 47(393):251-261, 1974.

Muniz, W.de F. Estudo de um retentor de chama do tipo vortical/axial com pás de ângulo variável. (Disssertação de Mestrado) - Instituto de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 1993. 93 p. (INPE-5558-TDI/538).

Simmons, H. The correlation of drop-size distributions in fuel nozzle sprays. Journal of Engineering for Power, 99:309-319, 1977.

Wigg, L.D. Drop-size prediction for twin-atomizers. Journal of the Institute of Fuel, 37(286):500-505, 1964.

ABSTRACT

This work describes the research results of spray pulsating combustion in a Rijke tube. Two types of atomizers were utilized: Y and solid cone. The first was designed and built specially for this work and the second was purchased from a commercial supplier. Both atomizers were characterized, to evaluate the spray mean diameters, with a PDPA (Phase Doppler Particle Analyzer) laser system. The operation regions for which oscillations excited in the combustor were determined. With the Y atomizer, oscillations did not present a defined structure, and the amplitudes varied with no control. With the solid cone atomizer, operation regions, for which strong oscillations occurred in the combustor, were observed. The corresponding spray mean diameters for these regions were also determined.

EFFECT OF PRESSURE ON SINGLE PARTICLE COMBUSTION RATE

Carlos A. Gurgel Veras
EPUSP, Mechanical Engineering Department, São Paulo SP
João Andrade de Carvalho Jr.
LCP/INPE, Rod. Presidente Dutra Km 40, Cachoeira Paulista SP
Jaakko Saastamoinen
VTT/Energy, P.O. Box 1603, 41101 Jyväskylä, Finland

ABSTRACT

A recently presented model used for the prediction of heat and mass transfer effects in the boundary layer of a reacting coal particle was extended to analyze the trends if the pressure is increased well above atmospheric conditions. Pressure dependent kinetic parameters were necessary in order to reproduce the experimental results. Increase in oxygen concentration and total pressure greatly increased the particle reaction rate. A further increase leads the system towards diffusion controlled and, as a consequence, reaction rates reach a maximum.

INTRODUCTION

The field of pressurized coal combustion has gained great attention recently. The aim is mainly to improve thermal efficiency and reduce gas emissions. Using pressurized combustion, a 50 % fuel energy recover might be reached employing combined power cycles against 38 %, in average, up to date. Furthermore, a reduction in the size of the furnaces might also be accomplished.

For pulverized coal combustion, four stages can be well characterized - the initial particle heating phase, coal thermal degradation, and at last homogeneous and heterogeneous reactions in the boundary layer and at the walls of the porous network of the remaining char as well as at the outer surface. All these processes might somewhat be distinct in time or overlap to some extent. A numerical model which simulates the burning of single coal particles must rely on experimental parameters from all the processes cited above to closure the mathematical formulation. Therefore, to simulate all these steps, experimental parameters for devolatilization, usually taken under inert reactor atmospheres, and char oxidation data from a wide range of temperature and pressure in the reactor ought to be provided. For hydrocarbon reactions, data from atmospheric conditions give, somewhat, reasonable results as a first approximation towards solving such a complex phenomenon. Nevertheless, modeling validation will be supported only by experiments taking place in a well controlled reactor atmosphere, in which the burning of the particles will be closer to a real situation.

Many authors have studied the effect of increasing pressure on the products yields from pyrolysis of coal (Anthony, 1976; Griffin, 1994). There seems to be a common observation, experimentally and theoretically, about the reduction in the total yields due to secondary reactions in the voids and pores of the coal (James, 1976). Mass transfer effects in the coal matrix were inferred as the reason why more char is formed. Since the escape of volatiles is reduced due to pressure effects, the more reactive compounds (tar) have an extra time inside the coal porous structure to undergo secondary deposition reactions. Up to 10 atm and 200 μm particle diameter the pressure effects can be assumed as of little importance. As the particle size and external pressure increase, the escape of volatiles turns to be a competition between internal transport and deposition reaction.

The behavior of pulverized coal particle under pressure has been studied to some extent (Monson et al., 1995; Mühlen, 1995, Saastamoinen et al., 1996). For pulverized coal combustion, the devolatilization time is thought to be one order of magnitude shorter than char oxidation time. As a consequence, surface reactions parameters for pressurized conditions must also be sought for proper modeling on char oxidation. Monson et al (1995) have performed many char oxidation experiments at atmospheric and elevated pressures allowing determination of global reaction rate coefficients which might be applied for coal combustion. The temperature range, in their experiments, comprises well those found in actual pulverized coal combustors.

VTT/Energy has a pressurized entrained-flow reactor (PEF) whose maximum operating temperature is 1400 ° C and pressures as high as 20 bar can be reached. Aho et al. (1995) have investigated the effects of pressure, oxygen partial pressure and temperature on the formation of N_2O, NO, and NO_2 from pulverized coal by means of experimental work done in the PEF. Of great importance, a reduction in NO emissions was identified as the reactor pressure was increased. The results from a batch of tests carried out in well-controlled operation conditions with this PEF (Saastamoinen et al., 1996) are used here. Particle temperature and 90 % burnout times are employed for comparison, since gas composition and temperature distribution in the boundary layer of a burning particle are still a challenge to be determined experimentally. It has been shown that, to a less or great extent, pressure alters the ignition, temperature, and reactivity of coal particles. Based on these observations, we present in this work a numerical model, recently used for the prediction of heat and mass transfer effects in the vicinity of a devolatilizing coal particle (Gurgel and Saastamoinen, 1995), extended to solve a resembling problem in which the gas is well above atmospheric pressure. The model is fully transient and may treat particles of any size under a wide range of combustion environment. Musarra et al. (1986) presented a numerical model to describe heat and mass transfer in the vicinity of a single reacting coal particle in an atmospheric environment. The model is two dimensional, but one dimensional simulations have shown meaningful results at low particle Reynolds numbers. Nothing was presented for pressurized conditions. Saastamoinen et al. (1995) presented a theoretical and experimental study on pressurized pulverized fuel combustion in different concentrations of oxygen

and carbon dioxide. The experiments were performed in the PEF reactor mentioned above. The theoretical analysis covered the heat and mass transfer effects under pressure, and, more importantly, the initial heating stage of a particle. The analysis was completed by a shrinking core model, which assumed only surface reactions, for char combustion and a two film model for the CO oxidation in the boundary layer. The results gave good agreement when compared to the experimental data from the PEF reactor.

MATHEMATICAL FORMULATION

In order to make the problem numerically treatable, some assumptions have to be made. In the solid matrix, the particle temperature is time-dependent and a function of the radial position. The particle is divided in shells where the local temperature history is used for pyrolysis reactions. This gives a local conversion for the particle interior. Devolatilization takes place with decreasing density and liberation of volatiles is assumed to be instantaneous. Particle swelling is not taken into account. When all the volatile matter has gone, burning takes place with a shrinking radius. After every time step, the carbon consumption is used to calculate the surface regression by means of a Newton-Rapson routine. With the updated interface, a new mesh is defined and the integration proceeds. Nevertheless, as long as oxygen is reaching the particle surface, pyrolysis and char combustion may occur simultaneously. Radiation from the reactor walls is accounted for in the heat transfer to the particle. Soot radiation is neglected. No further simplifications of major importance were made.

The following system of equations is solved along with appropriate initial and boundary conditions. For the gas phase, conservation of mass, species, energy, momentum and state equation are given by

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \rho u\right) = 0 , \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho Y_k\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \rho u Y_k\right) = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \rho D_{km}\frac{\partial Y_k}{\partial r}\right) + \dot{w}_k W_k , \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(c_g \rho T_g\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 u c_g \rho T_g\right) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \lambda_g \frac{\partial T}{\partial r}\right) - \sum_{k=1}^{NS}\Delta h_k \dot{w}_k , \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho u\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \rho u u\right) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \mu \frac{\partial u}{\partial r}\right) - \frac{\partial p}{\partial r} , \tag{4}$$

$$p = \rho R_u T_g \sum_{k=1}^{NS}\frac{Y_k}{W_k} . \tag{5}$$

For the solid phase, conservation of total mass and energy is given by

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \dot{m}_v''\right) , \tag{6}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(c_p \rho_p T_p\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 u c_g \rho T_p\right) = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \lambda_p \frac{\partial T_p}{\partial r}\right) + \frac{\partial \rho_p}{\partial t}\Delta h_d \tag{7}$$

The initial conditions (at $t = 0$) are

$$Y = Y_{k,0} , \quad T = T_0 , \quad p = p_0 , \quad u = 0$$

$$T_p = T_{p,0} , \quad \rho_p = \rho_{p,0} .$$

The boundary conditions at particle surface and $t > 0$ are

$$T(r = r_p) = T_p(r = r_p) , \qquad \dot{m}_v'' Y_k = \left|\rho u Y_k + \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial r}\right|_{r=r_p}$$

$$\left(\lambda_p \frac{\partial T_s}{\partial r}\right)_{r=r_p} = \left(\lambda_g \frac{\partial T}{\partial r}\right)_{r=r_p} + \varepsilon\sigma(T_w^4 - T_p^4) + \sum_i^{SR}\dot{s}_i \Delta h_{r,i} ,$$

and at undisturbed flow

$$T = T_\infty , \quad p = p_\infty , \quad Y_k = Y_{k,\infty} .$$

To complete the boundary equations, symmetry condition is applied at the particle center.

The transport coefficients for the gas phase are based on the kinetic theory of gases. Specifically in this work, the theory of Chapman and Enskog (1939) is employed. Viscosity, thermal conductivity , and diffusivity of a component into the mixture are all function of mass fraction, temperature and pressure. The specific heat is given as a polynomial function of temperature. The coefficients were taken from the NASA SP-273 (Gordon and Mc Bride, 1971) computer code.

$$c_{g,k} = \sum_{i=0}^{4} a_i T^i . \tag{8}$$

Specific heat and thermal conductivity for the coal are given by Merrick's formulation (1983), which is based on the Einstein form of quantum theory.

Devolatilization Model

The present formulation describes the combined phenomena taking place in the boundary layer and their feed-back influence to the solid fuel particle. Devolatilization of coal particles in an oxidizing environment may proceed at different temperature levels. The presence of a volatile flame in the vicinity of a particle undergoing pyrolysis substantially affects the particle heating rate and its time-dependent temperature. The devolatilization model associated to its kinetics seems to play an important role in such treatment. Based on this premise, the model presented by Kobayashi et al. (1976) was chosen in this work. It consists of two competing first order overall reactions, each degrading coal to residual chars (R_1 and R_2) and volatiles (V_1 and V_2), as shown in Figure 1. The particle weight loss due to thermal decomposition is modeled with a pair of parallel first-order irreversible reactions. The rate equation is

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} = -\left(k_1 + k_2\right)\rho_{cu} . \tag{9}$$

The instantaneous mass rates of production of volatiles are proportional to the undergraded part of the coal particle ρ_{cu}. The

parameters for the two competing reactions are given below, in Table 1.

Figure 1: Coal thermal degradation, Kobayashi et al (1976) model.

Table 1: Kinetic parameters for the pyrolysis model. Kobayashi et al. (1976).

$k_1 = B_1 \exp\left(-E_1 / RT_p\right)$		$k_2 = B_2 \exp\left(-E_2 / RT_p\right)$	
$\alpha_1 = 0.4$		$\alpha_2 = 0.8$	
$B_1 = 2 \times 10^5$	(1/s)	$B_2 = 1.3 \times 10^7$	(1/s)
$E_1 = 104.6 \times 10^6$	J/kmol)	$E_2 = 167.4 \times 10^6$	(J/kmol)

The Reaction Mechanisms

The mechanisms proposed by Westbrook and Dryer (1981) are used for the homogeneous reactions in the boundary layer. To do so, the composition of the volatiles released must be known. The devolatilization of a coal particle produces innumerable compounds ranging from light hydrocarbons to large macromolecules (tar), water, CO, CO_2 and many other species. In the present work the lighter hydrocarbons are represented uniquely by CH_4 while the heavy ones (tar) by C_6H_6. The mass fractions of volatiles are taken from Anthony and Howard (1976). Volatile products (% by weight) are made up of a blend with light hydrocarbons, tar, water, CO, and CO_2. In the flame region, at high temperatures, there is an increase in the amount of free radical species and, more importantly, in the CO/CO_2 ratio, which lowers the adiabatic flame temperature. The detailed chemical kinetics takes such behavior into account at the expense of a great number of species being considered. Without increasing substantially the number of equations to be solved and still giving good results, Westbrook and Dryer (1981) have discussed the properties of two-step reaction mechanisms based on the results from the detailed mechanism. Parameters for the two-step reaction mechanisms in which the hydrocarbons oxidize firstly to CO followed by the conversion of CO to CO_2 are given by:

$$CH_4 + \tfrac{1}{2}O_2 \Rightarrow CO + 2H_2O\,. \qquad \text{(R1)}$$

$$k_{R1} = 6.7 \times 10^{12} \exp(-202.6 \times 10^6 / RT)\left[CH_4\right]^{0.2}\left[O_2\right]^{1.3}.$$

$$C_6H_6 + \tfrac{9}{2}O_2 \Rightarrow 6CO + 3H_2O\,. \qquad \text{(R2)}$$

$$k_{R2} = 5.2 \times 10^{11} \exp(-125.6 \times 10^6 / RT)\left[C_6H_6\right]^{0.25}\left[O_2\right]^{1.5}.$$

$$CO + \tfrac{1}{2}O_2 \Rightarrow CO_2\,. \qquad \text{(R3)}$$

$$k_{R3} = 1.0 \times 10^{14.6} \exp(-167.4 \times 10^6 / RT)\left[CO\right]^{1.0}\left[H_2O\right]^{0.5}\left[O_2\right]^{0.25}$$

$$CO_2 \Rightarrow CO + \tfrac{1}{2}O_2\,. \qquad \text{(R4)}$$

$$k_{R4} = 1.0 \times 10^{8} \exp(-167.4 \times 10^6 / RT)\left[CO_2\right]^{1.0}.$$

The reverse reaction (R4) is necessary in order to keep the CO/CO_2 equilibrium ratio bounded for proper heats of reaction and pressure dependence in the flame region.

Monson et al (1995) presented a global model for char oxidation related to the external surface area for four different levels of pressure. This heterogeneous surface reaction for a single spherical particle in kg/m^{2}s of carbon is

$$\dot{s}_1 = A \exp\left(-E / RT_p\right) P_{O_2}^{0.5}\,. \qquad (10)$$

The values of A and E for different pressures are given in Table 2.

Table 2: Global char reaction rate coefficient. Monson et al (1995).

Pressure (atm)	A (kg/m^{2}s)(atm)$^{0.5}$	E (J/kmol)
1	17.8	60.21×10^6
5	0.382	14.24×10^6
10	0.227	15.90×10^6
15	0.098	20.51×10^6

The oxidation/gasification reaction at the surface of the particle may give CO or CO_2 at different amounts as a function of surface particle temperature. Below 1400 K the CO_2 production is much greater than CO. As particle temperature increases, a shift leading to an increase in CO formation is expected, and above 2200 K CO is the only product. The heterogeneous reaction is given by

$$C + \tfrac{1+\psi}{2}O_2 \Rightarrow \psi CO_2 + (1-\psi)CO\,, \qquad \text{(R5)}$$

where the ratio of CO to CO_2 formed by the reaction R5 is

$$\frac{1-\psi}{\psi} = A_c \exp\left(-E_c / RT_p\right). \qquad (11)$$

The parameters A_c and E_c determined by Monson et al (1995) have the values 3.0×10^8 and 251.2×10^6 J/kmol, respectively. CO_2 gasification is also taken into account and the parameters from Bradley et al. (1984) were employed in this work. The heterogeneous reaction is

$$C + CO_2 \Rightarrow 2CO \qquad \text{(R6)}$$

$$\dot{s}_2 = 9.0 \times 10^3 \exp\left(-285.14 \times 10^6 / RT_p\right) P_{CO_2}^{0.5}\,.$$

NUMERICAL FORMULATION

The set of conservation equations is discretized through the well known method described by Patankar (1980), resulting in a system of algebraic equations which are solved in sequence by a Thomas-algorithm. Nonlinearity and interlinkage are handled by iteration. To improve convergence, an adaptive grid generation routine was included. The steep gradients and values of temperature, oxygen, and carbon monoxide served as a base for the equidistribution of a positive weight function technique employed for the grid point locations. The pressure term in the momentum equations brings an additional problem when calculating the flow field from the particle to its boundary. The SIMPLER procedure is employed in a staggered grid for the velocity field calculations. The computer program was written in FORTRAN 77 and calculations were carried out with double precision. The program runs in a HP-700 workstation. When reactions are on the way, the number of iterations average from 100 to 1000, for one time step. Total computational time averaged between 5 to 15 hours. Computations were carried out until 90% of the original mass of the particle was burnt.

SOLUTION TECHNIQUE

The initial grid is set for the domain of calculation, which consists of the coal particle and its boundary layer. The particle is divided in 20 control volumes (shells) and the boundary layer in at least 80 control volumes. The term boundary layer refers to the gas layer surrounding the particle where concentrations, temperature and other properties are distinct from the stagnant gas.

The stagnant film surrounding the particle is thought to be large enough that particle interaction does not occur. In this work, the numerical boundary extends to 40 times the particle radius. This system (particle and its surrounding stagnant film) is brought to one hot environment (reactor tube) which gives the boundary conditions for the undisturbed flow. Temperature and gas composition for this point are kept invariant throughout the simulation

RESULTS AND DISCUSSION

A set of simulations was carried out. Two different coals were chosen, one bituminous, 31.9% volatile matter content, and a less reactive one, anthracite, averaging 8.5% proximate volatile matter. A third fuel was also investigated in order to check the parameters for global heterogeneous reactions. Char particles, 820 kg/m^3 initial density, burning at different gas temperature and pressure, were employed. Although CO_2 partial pressure in the experiments was set to 1 atm pressure, for the numerical simulations we employed half of that value. Such a high concentration in carbon dioxide affects much the CO to CO_2 ratio in the flame region due to the reverse reaction R4. However, increasing the pressure of the reactor the effect is somewhat diminished. In Figure 2, the unsteady particle surface temperature is shown, as well as the normalized mass consumption. The curve for the normalized mass consumption has two distinct regions. The first characterizing the devolatilization phase (decreasing density) followed by a second one (receding surface) where mass consumption is lowered. From the first stage of the curve it is clearly seen an increase in the volatile yields. Despite of the fact that the coal contains 31.9 % proximate volatile matter, a further 15% was obtained as a consequence of the high heating rates and temperatures reached by the particle. This trend was observed experimentally by Kobayashi et al (1976), and their pyrolysis model does reflect the increased yields. Furthermore, the enhancement in the yields is favorable on account of the particle mass consumption since homogeneous reactions are much faster than the heterogeneous ones, reducing the space requirements for pulverized combustion of coal.

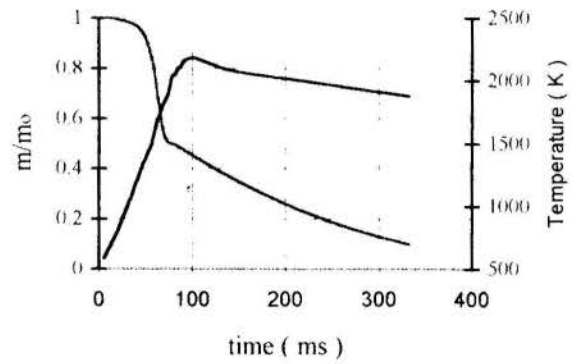


Figure 2: Surface temperature and normalized mass loss of a 160 μm bituminous coal particle at 1450 K and 2 atm reactor gas and 0.5 atm O_2 and CO_2 partial pressures.

A peak in particle temperature is seen at 100 ms, after escape of volatiles has vanished. At this temperature level, CO is the sole product at particle surface. This CO is further oxidized close to particle surface but heat generated is not enough to balance the combined conduction-radiation energy losses from the particle. However, a pseudo steady state might be assumed for the char oxidation phase as an inspection of the mass loss curve indicated by Figure 2.

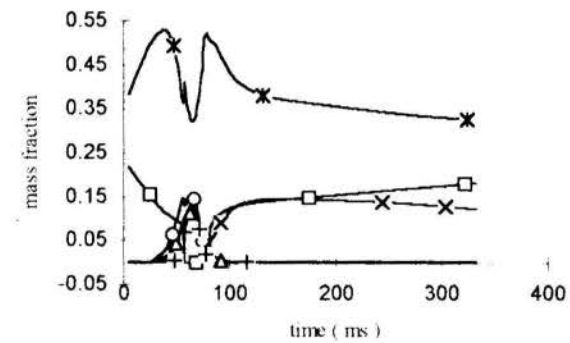


Figure 3: Surface mass fraction for the case in fig. 2. - □ - O_2, - + - H_2O, - * - CO_2, - × - CO, - o - tar , - Δ - CH_4.

Figure 3 shows the time dependent history of gas mass fractions at the particle surface towards its burnout time. Coupled with Figure 2, this figure gives a good insight of the highly unsteady combustion behavior of the coal particle before char oxidation prevails. Gas phase ignition takes place at nearly 57 ms consuming all oxygen available in the immediacy of the particle. CO formation increases as well as water vapor and CO2. A fraction of the heat generated by the reactions rises particle temperature, and the leftover diffuses away. The mass flow rates of light and heavy hydrocarbons increase sharply preventing oxygen to reach the particle surface. Heterogeneous reactions are not possible and the flame moves away from the particle surface where stoichiometry is more favorable for hydrocarbons and CO

oxidation. By the end of the devolatilization, the flame is moving back to the particle surface and heterogeneous reactions resume, as depicted by Figure 4. At this point, the particle surface reaches its maximum temperature.

Figure 4 shows the boundary layer temperature distribution for the case presented in Figure 2. The oxidation of volatiles to CO, followed by the slower conversion of CO to CO_2, takes places in a broad region which extends 8 particle radii. Such a behavior indicates that a thin flame approach for the combustion of volatiles must be taken with care. For char oxidation, the conversion of CO to CO_2 is meaningful to 3 particle radii from the surface. This region produces almost 80% of energy on account of homogeneous reactions.

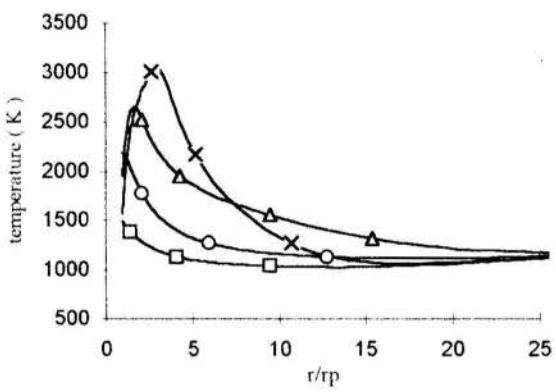


Figure 4: Temperature distribution in the boundary layer. Time is: - □ - 56 ms, - × - 59 ms, - Δ - 76 ms, - o - 110 ms.

Figure 5 shows a comparison between experimental data and simulations carried out by the model presented in this work. The parameters concerning reactor gas and the fuel composition employed are listed in Table 3. The predicted temperatures are averaged from the time when pyrolysis vanish to 90 % burnoff. The experimental data are mostly from such range since the flame is attached to the surface of the particle providing a more confident way to measure particle temperature. Simulations were performed at low and elevated pressures, with a variety of bulk gas composition and fuels. An increase in the particle reaction rate is evident by comparison between cases 8 and 9, when total pressure is reduced from 8 to 5 atm, at constant oxygen partial pressure, and near the same gas bulk temperature. On the other hand, increasing oxygen partial pressure at constant total pressure, greatly improves the char oxidation rate - cases 2 and 6, respectively. Such a behavior was observed for all the simulations carried out, unless when the total pressure was 15 atm. Experimental observation gave particle temperature near 1900 K while theoretical simulation, used in this work, a 1650 K, as a maximum, at 70% burnoff time. We believe that internal burning is the reason for such high temperature. For coal A (anthracite) and coal B (bituminous) the trends were exactly the same. As pressure increases from 5 to 8 atm (cases 9 and 8 respectively) a reduction in particle temperature was obtained either experimentally or theoretically. The observed increase in the overall reaction rate, as oxygen partial pressure increases (the other conditions being constant) is a consequence of the faster heterogeneous reactions rates leaning the system more towards diffusion controlled. The model has a tendency in giving higher reaction rates than the measured ones. Nevertheless, this inclination is the same for a broad range of reactor atmosphere and fuel size and type. As a whole, the results are in very good agreement with the measured ones, for most of the cases analyzed.

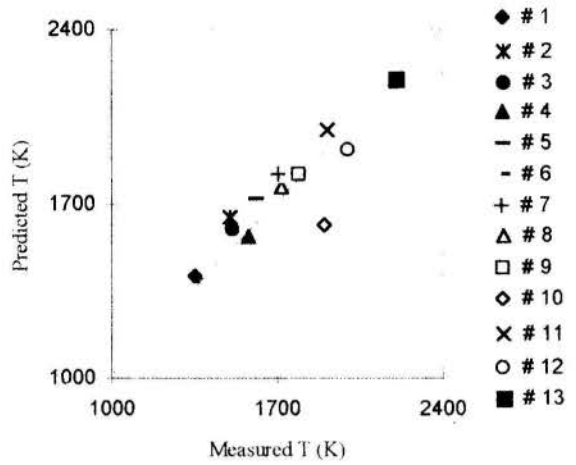


Figure 5: Predicted particle temperature, comparison between modeling and experimental for two different coals and char.

Table 3: Parameters for the cases in figure 5. Units are atm and Kelvin. Coal data are from Saastamoinen et al. (1996) and char data from Monson et al. (1995)

#	P_{total}	PO_2	T_{gas}	Fuel
1	15	0.75	987	char
2	10	0.50	1170	char
3	8	0.50	1150	coal A
4	15	1.50	987	char
5	5	0.50	1150	coal A
6	10	1.00	1170	char
7	8	0.50	1150	coal B
8	8	0.50	1450	coal A
9	5	0.50	1450	coal A
10	15	3.25	987	char
11	5	1.00	1130	char
12	10	2.00	1170	char
13	5	1.00	1330	char

CONCLUSIONS

Pressure dependent kinetic parameters must be employed for proper modeling of particle combustion at high pressure. The model presented here showed a good agreement for a broad range of burning conditions making use of these parameters. It was indicated by the simulations an increase in particle reaction rate when O_2 partial pressure was increased, keeping the other variables constant. For pressurized conditions, improvement in the burning is attained since the flame is positioned closer to the particle surface, due to higher bulk oxygen concentration. Further increase in O_2 concentration did not improve the reaction rate at the expected proportion. A leaning towards diffusion controlled process was identified. This suggests the existence of an ideal

particle size for certain furnace conditions. Performing simulations in the model, here presented, may give a first insight in the overall behavior of the pressurized burning system without necessity of carrying out expensive experiments.

ACKNOWLEDGMENT

The authors acknowledge CNPq Brazil for the scholarship granted to Carlos Gurgel.

REFERENCES

Aho, M. J., Paakkinen, K. M., Pirkonen, P. M., Kilpinen, P., and Hupa, M., The effects of pressure, Oxygen Partial Pressure and Temperature on the Formation of N_2O, NO, and NO_2 from Pulverized Coal, Combustion and Flame, (1995).

Anthony, D. B. and Howard, J. B., Coal Devolatilization and Hydrogasification, AIChE, vol 22, No. 4, 1976.

Bradley, D., Dixon-Lewis, G., Habik, S. E., and Mushi, E. M. J., Twentheth Symposium (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburg, 1984, pp 931-940.

Chapman, S. and T. G. Cowling: The Mathematical Theory of Nonuniform Gases, Cambridge, New York, 1939.

Gordon, S. and McBride, B. J., Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman-Jouguet Detonations, NASA SP-273, 1976.

Gurgel, C.A.V. and Saastamoinen, J. J., Boundary Layer Combustion of Volatiles, Nordic Seminar on Thermochemical Conversion of Solid Fuels, Norwegian Institute of Technology, 13-14 December 1995.

Griffin, T. P., Howard, J. B., and Petters, W. A., Pressure and Temperature Effects in Bituminous Coal Pyrolysis: Experimental Observations and a Transient Lumped-parameter Model, Fuel vol 73, No. 4, 1994.

James, R. K., Mills, A. F., Analysis of Coal Particle Pyrolysis, Letters in Heat and Mass Transfer, vol. 3, Pergamon Press, 1976.

Kobayashi, H., Howard, J. B., and Sarofim, A. F., Coal Devolatilization at High Temperatures, Sixteenth Symposium (Inter.) on Combustion, The Combustion Institute, p. 411, 1976.

Monson, R. C., Germane, G. J., Blackham, A. U., and Smoot, L. D., Char Oxidation at Elevated Pressures, Combustion and Flame 100, 1995.

Mühlen, H. J. and Sowa, F. Fuel, vol. 74, No. 11, 1995.

Musarra, s. P., Fletcher, T. H., Niksa S. and Dwyer, H. A., Heat and Mass Transfer in the Vicinity of a Devolatilizing Particle, *Comb. Sci. and Tech.*, 1986, vol 45, 289-307.

Patankar, S. V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw-Hill Book Company, New York, 1980.

Merrick, D., Mathematical Models of the Thermal Decomposition of Coal, *Fuel*, vol 62, 1983.

Saastamoinen, J. J., Aho, M. J., Hämäläinen, J. P., Pressurized, Pulverized Fuel Combustion in Different Concntrations of Oxygen and Carbon Dioxide, American Chemical Society, 1995, to be published.

Westbrook, C. K., and Dryer, L. F., Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames, *Comb. Sci. and Tech.*, 1981, vol. 27, pp. 31-43.

NOMENCLATURE

B	pre-exponential factor for coal devolatilization
c_p	specific heat.
D_{km}	diffusivity of species k into the mixture
E	activation energy
$\dot{m}_v''$	volatiles mass flux
Δh	heat of combustion or devolatilization
k_p	thermal conductivity of coal
R_u	universal gas constant
r	radial distance
SR	total number of heterogeneous reactions
$\dot{s}$	rate of carbon consumption
T	temperature
t	time
u	velocity
W_k	molecular weight of species k
$\dot{w}_k$	production rate of species k
Y_k	mass fraction of species k
ε	thermal conductivity of gas
ρ	gas density
ρ_p	particle density
ρ_{cu}	undegraded part of coal
σ	Stefan-Boltzman constant
μ	gas viscosity

Subscripts

0	initial
d	devolatilization
g	gas
k	species
m	mixture
p	particle
r	heterogeneous
v	volatiles
w	wall
∞	infinite

MODELACIÓN DE UN COMBUSTOR DE CARBÓN PULVERIZADO USANDO LA METODOLOGÍA DE VOLÚMENES FINITOS

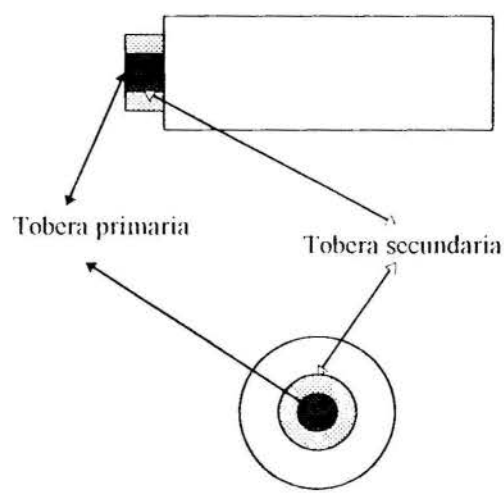
Juan Moreno (1), Arturo Barrientos (2), José Pares (3)
(1) Depto. Ingeniería Química Universidad de Magallanes, Casilla 113-D Punta Arenas,
(2) Depto. Ingeniería Metalurgia Universidad de Concepción ,Casilla 53-C Concepción,
(3) Pares y Alvarez Ingenieros Asociados, Concepción

SUMARIO

En este trabajo se emplea un código comercial FLOW3D, para simular el comportamiento de un combustor de carbón pulverizado. A partir de él, se determina que las relaciones usadas comúnmente para estimar tamaño de la cámara de combustión, entregan valores sobredimensionados. Además se emplea esta simulación, como un reactor experimental, y se realizan varios experimentos, entre ellos, variando flujos de alimentación de carbón, de aire secundario y el tamaño de partícula de carbón alimentada. Del mismo modo se predicen comportamientos a lo largo del reactor con respecto a los perfiles de temperatura, emisión de volátiles y productos de la combustión. Los resultados obtenidos nos permiten establecer algunos criterios de operación, de tal manera de tener una operación mas segura.

INTRODUCCIÓN

El carbón es una de las principales fuentes de energía actualmente en el mundo y por este motivo, se realizan innumerables estudios de su combustión . Por lo general, estos estudios se encontraban a pruebas experimentales, desarrollándose una serie de correlaciones de tipo empírico con las cuales se buscaba mejorar los rendimientos de los combustores de carbón. Sin embargo, con el mejoramiento de el hardware y software computacionales, es posible desarrollar estudios de simulación fenomenológicos de combustión, que permiten analizar y comprender de una manera más acabada toda la compleja problemática asociada a la desvolatilización de la materia prima, y posterior oxidación del sólido residual ("char"), que se lleva a cabo durante la combustión de carbón. El presente trabajo muestra una aplicación del uso de la técnica de volúmenes finitos a la simulación de un combustor de carbón pulverizado.



FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

Se considera un combustor cilíndrico, el cual se alimenta con una mezcla de aire primario y carbón pulverizado, a través de una tobera primaria. Por la tobera secundaria sólo se alimenta aire. El diseño preliminar de este combustor, se realiza resolviendo el balance de masa con los valores de operación recomendados por Smoot(1984)

El carbón a considerar corresponde a la categoría subbituminoso, con las características señaladas en la tabla 1.

Tabla 1 - Características del Carbón usado

Ítem	Valor	Unidad
Materia Volátil	42,2	% b.s.
Carbono Fijo	41,5	% b.s.
Cenizas	16,3	% b.s.
Poder Calorífero	$2{,}345\ 10^7$	J / Kg.

Con el fin de representar matemáticamente la situación descrita anteriormente, se hace uso de las ecuaciones de conservación de la materia, además de las ecuaciones de momento lineal y energía. Estas son llamadas también ecuaciones de Navier-Stokes y son a saber las indicadas a continuación:

Ecuación de Continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0 \qquad (1)$$

Ecuación de Cantidad de Movimiento

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = \mathbf{b} + \nabla \sigma \qquad (2)$$

Ecuación de Energía

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \nabla \bullet (\rho \mathbf{v} H) - \nabla(\lambda \nabla T) = \frac{\partial p}{\partial t} \qquad (3)$$

Es sabido que, en el caso de combustión, los volátiles que emergen de la partícula de carbón, producto de las altas velocidades de calentamiento, no tienen el tiempo suficiente para reaccionar y condensar en la partícula de carbón, por este motivo la producción de volátiles es mayor que la indicada por el análisis proximal. Los estudios de Badzioch y Hawkswy (1970) al respecto, indican que en carbones del tipo bituminosos-HV, el factor de sobreproducción de volátiles fluctúa entre los 1,35 a 1,85 veces la materia volátil indicada por el análisis proximal. Para el caso de carbones del tipo subbituminosos HV no se dispone de información experimental. Por lo tanto se supondrá para la simulación, que el factor de sobre producción será 1,5.

La desvolatilización es modelada usando el esquema de dos reacciones competitivas desarrollado por Kobayashi y et. al. (1980)

$$\dot{m}_{volatiles} = \left(K_{vol1}\alpha_1 + K_{vol2}\alpha_2\right)\left(m_{vo}e^{(k_{vol1}+k_{vol2})t}\right) \qquad (4)$$

donde :

$$K_{vol1} = A_1 e^{\left(\frac{B_1}{T_p}\right)} \qquad (5)$$

$$K_{vol2} = A_2 e^{\left(\frac{B_2}{T_p}\right)} \qquad (6)$$

Los valores de α_1 y α_2 son coeficientes empíricos y en nuestro caso usaremos los valores propuestos por Jamaluddin et al (1986) (α_1 = materia volátil proximal , $\alpha_2 = 2 \bullet \alpha_1$).

Para la modelación de la oxidación del char, se supondrá que este fenómeno sigue una reacción global de primer orden, según lo propuesto por Field (1967). En este caso, se consideraran partículas esféricas rodeada por una capa estacionaria, a través de la cual debe difundir el oxígeno para posteriormente reaccionar con el sólido residual (char). La velocidad de reacción, se calcula asumiendo que el proceso se encuentra limitado por la difusión del oxígeno hasta la partícula de carbón y por la reactividad efectiva de la partícula.

Para ello se considerará que la difusión de oxígeno esta dada por una expresión del tipo :

$$\dot{m}_{dif} = k_g\left(P_g - P_s\right) \qquad (7)$$

donde $$k_g = \frac{2{,}53 \cdot 10^{-7}}{R_p}\left[\frac{T_p + T_g}{2}\right]^{0.75} \qquad (8)$$

La velocidad de reacción estará dada por :

$$\dot{m}_{reac} = Ae^{\left(\frac{E}{RT_p}\right)} \qquad (9)$$

Luego la velocidad global de reacción será :

$$\dot{m}_{char} = \left[\frac{1}{\dot{m}_{dif} + \dot{m}_{reac}}\right] P_s 4\rho R_p^2 \qquad (10)$$

RESOLUCIÓN DEL PROBLEMA

La resolución del problema ya descrito se realiza usando el código computacional comercial FLOW 3D. Este código resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes, basándose en el trabajo de Patankar y Spalding (1972). Una de las ventajas de este código, es que el sistema de grilla de diferencia finita y el sistema de coordenadas, son entidades totalmente distintas. El sistema de coordenadas se emplea para definir la geometría y expresar las ecuaciones de transportes. Por otro lado la grilla puede ser ubicada en posición y orientación arbitraria con respecto al sistema coordenado.

Las ecuaciones (1),(2) y (3) pueden ser escrita, de una manera general, como:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v} \phi) = \nabla(\Gamma \nabla \phi) + S \qquad (11)$$

En donde ϕ es una variable cualquiera, Γ es un coeficiente de tipo difusivo y S es un término fuente. Maliska (1995), Pantankar (1980) , presentan de una manera detallada la generación de un algoritmo que permite resolver, de una manera numérica, la ecuación el problema planteado. Digamos que al hacer una integración de la ecuación (11) , tanto en el espacio como en el tiempo, sobre un elemento de volumen de control $\Delta x \Delta y \Delta z$, se llega a una expresión de la forma.

$$\frac{M_p \phi_p - M_p^0 \phi_p^0}{\Delta t} + \dot{M}_e \phi_e^0 - \dot{M}_w \phi_w^0 + \dot{M}_n \phi_n^0 - \dot{M}_s \phi_s^0 + \dot{M}_f \phi_f^0 - \dot{M}_b \phi_b^0 - D_{1e}\frac{\partial \phi_e^0}{\partial x_e} - D_{1w}\frac{\partial \phi_w^0}{\partial x_w} + D_{1n}\frac{\partial \phi_n^0}{\partial y_n} - D_{1s}\frac{\partial \phi_s^0}{\partial y_s} + D_{1f}\frac{\partial \phi_f^0}{\partial z_f} - D_{1b}\frac{\partial \phi_b^0}{\partial z_b} + L\left[S^\phi\right]^0 \qquad (12)$$

en donde:

$$M_p = \rho \Delta x \Delta y \Delta z$$

$$\dot{M}_i = \rho \mu \Delta A|_i$$

$$D_{1i} = \Gamma^{\phi} \Delta A|_i$$

con ΔA indicando área perpendicular al sentido de flujo que marca la dirección i.

Se escoge para el termino fuente una expresión del tipo

$$S^{\phi} = S_c + S_p \phi_p$$

y para la variable ϕ se escoge una función de interpolación del tipo

$$\phi^{\theta} = \theta\phi + (1-\theta)\phi^{0}$$

en donde el superíndices indica el tiempo t (en los casos transiente) o la iteración antigua (en estado estacionario), y sin superíndices se indica el tiempo t+Δt (en los casos transiente) o iteración nueva (en el caso estacionario).

Para los términos conductivos y advectivos se utiliza una interpolación WUDS (Weighted Upstream Differencing Scheme) , en el cual dependiendo del valor del número de Peclet se toma un esquema de diferencia centrales (Pe<2) o un esquema de tipo upwind (Pe > 2) .

Las otras ecuaciones existente se van evaluando en el centro del volumen de control para un tiempo t (en el caso transiente) o para el valor antiguo de la variable (en el caso estacionario),

RESULTADOS Y DISCUSIONES

El principal resultado que se puede inferir de la simulación presentada, es que las expresiones usadas normalmente para establecer el tamaño de la cámara de combustión, se encuentran sobredimensionadas. Si se usan las expresiones dada por Greco(1991), para estimar longitud de cámara de combustión , o bien se calcula este volumen a través de la ecuación de Rosin; Essenhigh(1967), se tendrá como consecuencia un tamaño mayor de cámara de combustión, entre un 50% a 180% más que el obtenido por simulación. Lo anterior es consecuente con el hecho de que, cuando se calcula el tiempo de combustión se supone que la partícula permanece estacionaria en el espacio, y rodeada de una masa de aire que no varía sus propiedades físico químicas, situación que no es real y se manifiesta en la simulación.

El efecto de usar una cámara de combustión de 7 m (combustor A) según expresión de Rosin y una cámara de 3,3 m (cámara B) obtenido después de un proceso de optimización, se puede apreciar en la figura 1. En ella se observa que el inicio de la combustión, manifestado por el comienzo de la emisión de volátiles, se retarda cuando usamos una cámara de mayor longitud..

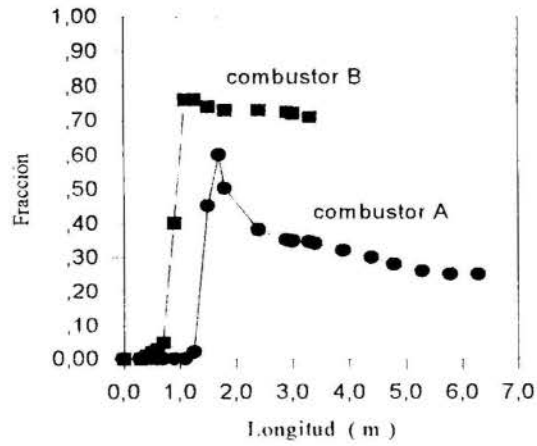


Figura 1- Producción de compuestos volátiles

A partir de la información obtenida, se procede por sucesivas simulaciones, a encontrar las dimensiones correctas para determinadas condiciones de operación. Los datos que definen nuestro caso base, se encuentran en la tabla 2.

Tabla 2- Características geométricas y de operación del caso base

Ítems	Valor	Unidad
Diámetro cámara de combustión	260	mm
Diámetro de tobera primaria	60	mm
Diámetro de tobera secundaria	100	mm
Longitud de cámara de combustión	3.000	mm
Carga de carbón	0,01667	Kg./s
Flujo de aire secundario	0,06094	Kg./s
Flujo de aire primario	0,12059	Kg./s
Temperatura de aire primario	358	°K
Temperatura paredes combustor	1600	°K
Temperatura de aire secundario	523	°K
Diámetro de partícula	75	µm

La simulación de este caso base, muestra que la producción de volátiles se inicia recién a los 2 m del inicio de la admisión de carbón. Este mismo efecto se ve a partir del perfil de temperatura, ya que un aumento marcado de ella, a una longitud de dos metros, nos indica que se inicia la ignición de los volátiles que salen del carbón.

Con el fin de estudiar la posibilidad de adelantar el inicio de la combustión, se comienza a variar la razón kilos de aire por kilo de combustible. Lo anterior se logra variando la velocidad del aire secundario. En las figuras 2 y 3 se muestra el efecto de cambiar la razón Kg. de aire por Kg. de combustible desde 10,9 (caso 1) a 8,5 (Caso 2). En dichas figuras se observa que se adelanta el inicio de la combustión en unos 50

cm. No se puede disminuir más la razón de Kg. de aire por Kg. de combustible si queremos que la llama se mantenga viva y dentro de la cámara de combustión .

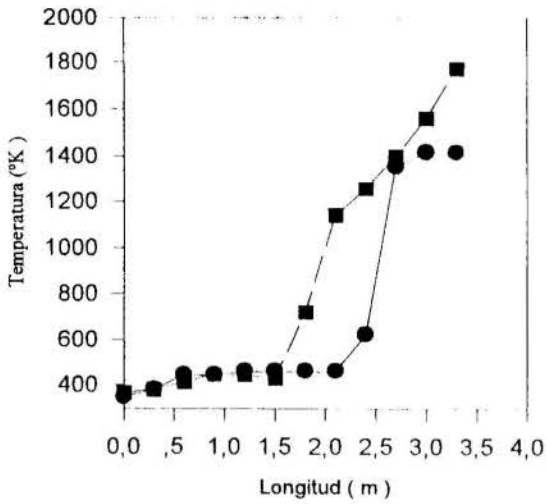


Figura 2- Perfil axial de Temperatura

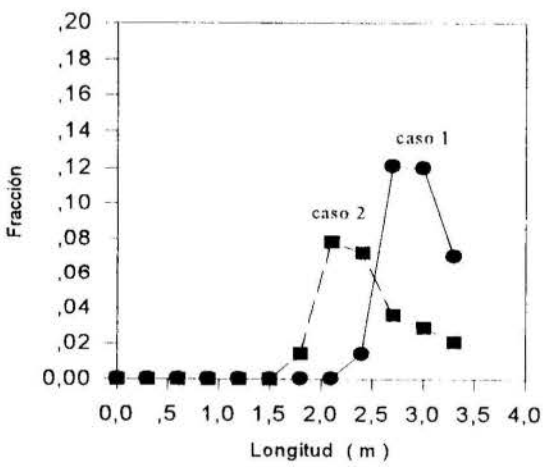


Figura 3 - Producción de compuestos volátiles

Otra alternativa experimentada, para adelantar el punto de ignición, fue la de modificar la carga de carbón y mantener contante la razón aire-combustible. El efecto de bajar la carga de carbón de 60 Kg./h (caso 1) a 40 Kg./h (caso 3) queda representado en las figuras 4 y 5. Se observa, que el frente de combustión se adelanta. Nuevamente, si queremos mantener la llama viva y dentro de la cámara de combustión, no debemos operar a valores menores.

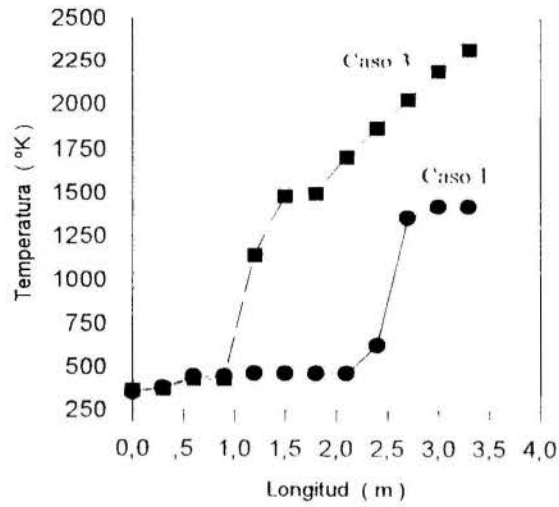


Figura 4 - Perfil axial de temperatura

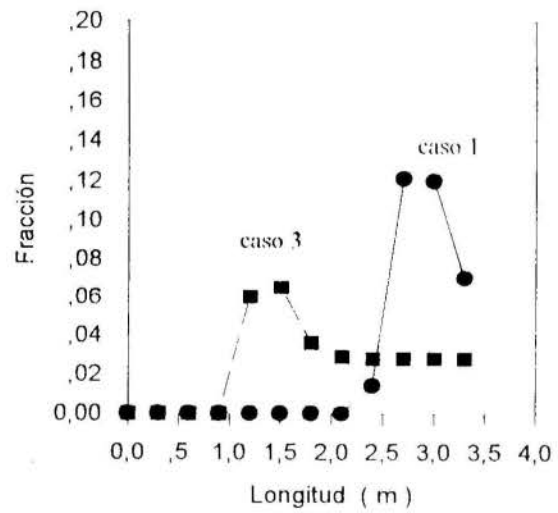


Figura 5 - Producción de compuestos volátiles

De la información anterior, se desprende que es factible adelantar el punto de ignición, disminuyendo la carga de carbón o bajando el flujo de aire secundario. Esto trae como consecuencia que el aire entra mas caliente a la zona de radiación.

Una muestra de las curvas de isovelocidades del campo de velocidad y isotemperaturas del campo de temperatura al interior del combustor se muestran en la figura 6 y 7

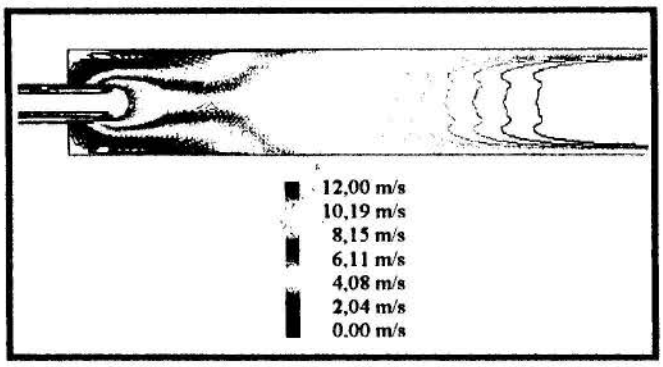


Figura 6 - Curvas de isovelocidades al interior del combustor.

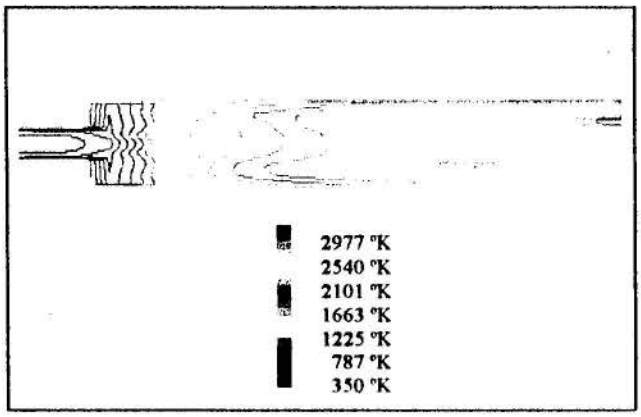


Figura 7 - Curvas de isotemperaturas al interior del combustor.

Las figuras 8 y 9 muestran el efecto de disminuir el tamaño de las partículas de carbón alimentado al combustor. Se observa que, a medida que el tamaño de ellas disminuyen, se adelanta el inicio de la combustión , como también se aumenta la temperatura de los gases que pasan a la zona de radiación. Ambos efectos se ven representados por el marcado aumento de la temperatura (la figura 8) o de la fracción de materia volátil (figura 9).

Entre los hechos de interés que nos muestran estas figuras, se pueden destacar:

El comportamiento de partículas entre el rango de 40 micrones a 75 micrones es prácticamente el mismo. La figuras muestran una marcada diferencia entre ellas y las partículas de 20 micrones y las de 100 micrones.

En la figura 9 se manifiesta que a medida que aumenta el diámetro de las partículas va desplazándose la ubicación del punto de mínima velocidad , que es coincidente con el punto de inicio de la emisión de volátiles, . Es decir, la preocupación de que, a medida que aumente la proporción de finos en la alimentación se puede producir retroceso de llama es cierta, sin embargo, la modelación muestra que si se trabaja en las condiciones óptimas, la magnitud de esta velocidad aumenta es decir el perfil de velocidades al interior del combustor se manifiesta con un mínimo más alto..

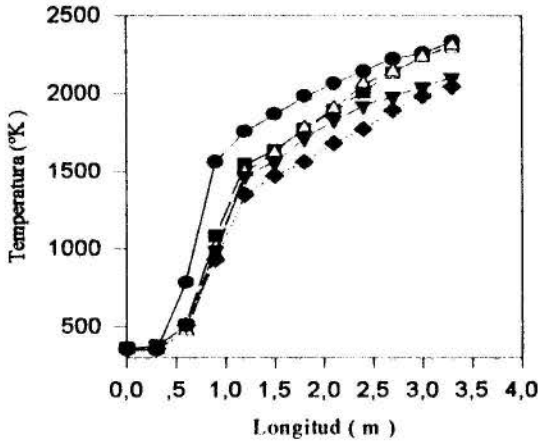


Figura 8- Perfiles de Temperaturas para diferentes diámetros de partículas de carbón.(• 20 μm. □ 40 μm Δ 50 μm ∇ 75 μm ♦100 μm)

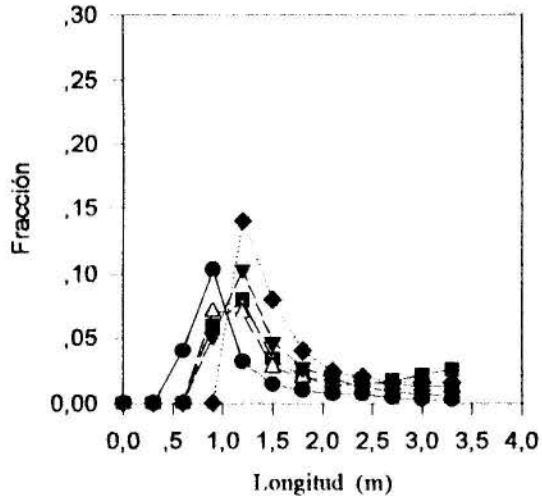


Figura 9 - Producción de compuestos volátiles para diferentes diámetros de partículas de carbón (• 20 μm. □ 40 μm Δ 50 μm ∇ 75 μm ♦100 μm)

BIBLIOGRAFÍA

Badzioch S.,Hawkslwy P., 1970 " Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles", Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.,Vol 9, N°.4,

Essenhigh Robert, 1967 "Combustión Phenomena in Industrial Flames", Industrial and Engineering Chemistry , Vol59,N°7 pp52-59

Field M.A.,et.al. 1967 " Combustión of Pulverized Coal" British Coal Utilization Research Association, Leatherhead, England

FLOW -3D , Manual de Usuario

Greco C.,1991 Apuntes curso de Combustión .

Jamaluddin, A.S., Truelove, J.S., y Wall, T.F., 1986 Combustion and flame, Vol63 pp 329

Kobayachi,H. y Howard, J.B. y Sarofim, A. F.,1980 18° Simposio de Combustión, The Combustión Institute Pittsburg, p 411.

Maliska, C.R.,1995 "Transferencia de calor e mecanica dos fluidos computacional" LTC Editores

Smoot Douglas L ,1984. "Modeling of coal combustión processes" , Prog.Energy Combust. Sci. , Vol 10, pp229-372

Patankar S. y Spalding D.B. ,1972, "A calculation procedure for heat,mass and momentum transfer in trhee-dimensional parabolic flows", Int. J. Heat Mass Transfer, Vol 15, pp1878-1806

Patankar S.V. ,1980, "Numerical heat transfer and fluid flow" Hemiphere Publishing Corporation

ABSTRACT

A two dimensional theoretical study of pulverized coal flow and combustion by diffusion flames is presented. The model predicts gas flow, species concentration, and temperature in cylindrical geometry combustion chamber. The conservation equations are solved using the $\kappa-\varepsilon$ turbulence model. The model is used to investigate the effects produced on the flame by change in coal flow, particle diameter, or secondary air flow.

TRIBUIÇÃO DE GOTAS FORMADAS POR JATOS MÚLTIPLOS NÃO COPLANARES

H.S. Couto
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá
Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho

J.A. Carvalho Jr. e D. Bastos Netto
Laboratório Associado de Combustão e Propulsão
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

RESUMO

Sprays gerados por um par de jatos líquidos colidentes podem ser empregados em câmaras de combustão de motores ou sempre que for apropriada uma distribuição aproximadamente elíptica para as gotas do spray. A modelagem de peliculas formadas por tal par de jatos líquidos cilíndricos colidentes com os aspectos inerentes de sua própria estabilidade e o conhecimento da dinâmica de ruptura de folhas líquidas viscosas podem ser usados para descrever a distribuição do tamanho das gotas formadas pela colisão daqueles jatos. A modelagem é desenvolvida para condições de atmosfera quiescente e números de Weber maiores que dez. Isto permite a determinação de parâmetros essenciais ao projeto de atomizadores que utilizem jatos colidentes na formação de sprays, tais como o SMD ("Sauter Mean Diameter") nos problemas de câmaras de combustão. Entretanto o emprego de três ou mais jatos não coplanares é a configuração mais comum para a atomização de combustíveis e oxidantes líquidos propergólicos nas câmaras de combustão de motores-foguete. Até o presente não existe correlações para aqueles arranjos geométricos, pois a dinâmica da folha cônica formada ainda carece de formulação matemática. O presente trabalho apresenta um modelo para a evolução de folhas líquidas cônicas e a consequente estimativa do SMD das gotas formadas na colisão de N-*jatos* ($N \geq 3$).

INTRODUÇÃO

A compreensão da dinâmica de filmes líquidos é primordial em diversos campos da engenharia, tais como no desenvolvimento de tanques de propelentes líquidos por tensão superficial, no resfriamento de reatores nucleares com jatos líquidos anulares, no projeto de atomizadores tipo "fan-spray", "splash-plate" e jatos colidentes duplos, etc.

Como discutido por Dombrowski e Johns (1963), em vários tipos de atomizadores o líquido é ejetado pelo orifício final de descarga na forma de uma folha fina. A maneira pela qual essa folha fina é desintegrada em gotas depende das condições de operação. A fonte principal de instabilidades que causa a desintegração da folha em gotas está relacionada com a interação entre a folha e o meio gasoso circundante. A desintegração ocorre quando a amplitude de onda dessas instabilidades atinge um valor crítico e a folha rompe-se em fragmentos. Os fragmentos contraem-se em ligamentos instáveis sob a ação da força de tensão superficial. Gotas são produzidas quando esses ligamentos rompem-se a posteriori.

As características dessas ondas de instabilidades foram analisadas por Squire (1953) e Hagerty e Shea (1955) para folhas de espessura uniforme de líquidos invíscidos. Seus resultados foram aplicados com sucesso por Fraser et al (1962) para calcular tamanhos de gotas produzidos por injetores tipo "fan-spray", funcionando com líquidos de baixa viscosidade.

No modelo desenvolvido por Dombrowski e Johns (1963), o líquido possui viscosidade finita e a espessura da folha decresce conforme a distância do orifício de descarga aumenta. Eles derivaram uma equação baseada no conceito de uma folha líquida plana e seus valores teóricos compararam bem com resultados experimentais obtidos por outros pesquisadores.

Couto e Bastos-Netto (1991) e Couto et al (1992a) estenderam o modelo de Dombrowski e Johns para sprays formados por dois jatos colidentes. Couto et al (1992b) também estenderam o mesmo modelo para injetores tipo "splash-plate". Eles calcularam as respectivas funções distribuição de tamanho de gotas e seus principais diâmetros médios (i.e., "Sauter Mean Diameter", SMD, e "Mass Median Diameter", MMD, entre outros). Com dois jatos colidentes, a folha líquida permanece plana. Seus valores teóricos concordaram favoravelmente com os resultados experimentais obtidos por Queiroz (1992).

A configuração de três ou mais jatos impingentes não coplanares é bastante popular em sistemas de atomização de combustíveis e oxidantes em câmaras de combustão de foguetes a propelentes líquidos. Esses jatos múltiplos de líquidos incompressíveis, após chocarem-se entre si, geram folhas líquidas cuja forma pode ser aproximada por uma superfície cônica.

Embora haja um grande número de atomizadores que geram folhas líquidas cônicas em vez de planas, as correlações existentes para modelar o tamanho das gotas geradas pelos mesmos são todas semi-empíricas e de validade restrita (Lefebvre, 1989). Adicionalmente, essas correlações foram desenvolvidas para atomizadores tipo "pressure-swirl" e não para N jatos colidentes.

Baseando-se no trabalho de Dombrowski e Johns (1963) para folhas planas, este trabalho apresenta a derivação de um procedimento para calcular teoricamente o tamanho das gotas de um spray gerado por uma folha cônica.

DESCRIÇÃO DO PROBLEMA E SOLUÇÃO

A teoria desenvolvida para folhas líquidas planas pode ser usada no problema de folhas cônicas assumindo que: a) a folha cônica possui um raio de ruptura muito maior que sua espessura; b) uma vez sendo formada a folha cônica, a amplitude de qualquer perturbação ("ripple") é muito menor que o diâmetro do cone, de maneira que a folha cônica pode ser considerada como plana em relação à perturbação; c) o comprimento de onda

de qualquer perturbação formada no líquido cresce até uma amplitude igual ao raio do ligamento, de maneira que uma gota seja produzida por perturbação (Dombrowski e Johns, 1963).

O líquido é inicialmente aglutinado e se irradia como uma superfície aproximadamente cônica a partir do ponto de encontro dos jatos. Para verificar esta aproximação, um arranjo experimental de três jatos gerados por tubos de 0,5 mm de diâmetro foi montado e fotografado em operação com água colorida por permanganato de potássio. A Figura 1 mostra uma fotografia deste injetor. Foi verificado que a superfície líquida formada tem uma seção reta aproximadamente cônica, conforme se pode observar no detalhe da fotografia apresentado na Figura 2. Assim, a aproximação geométrica adotada mostra-se bastante razoável.

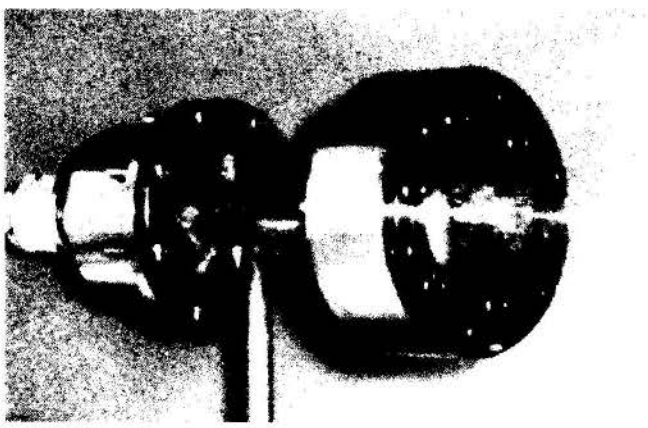


Figura 1 - Fotografia do injetor de três jatos colidentes.

Figura 2 - Detalhe do cone formado.

O mecanismo de desintegração de uma folha líquida em fragmentos, foi consideravelmente discutido por Dombrowski e Johns (1963), que derivaram a expressão (1) para o diâmetro desses ligamentos, d_L (cm). Esses ligamentos posteriormente se contraem em gotas sob a influência da força de tensão superficial.

$$d_L = \left(\frac{8}{9}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{k^2\sigma^2}{\rho_a \rho_L U^4}\right)^{\frac{1}{6}} \left[1 + 2.6\mu_L \left(\frac{k\rho_a^4 U^7}{72\rho_L^2\sigma^5}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^{\frac{1}{5}}, \qquad (1)$$

onde σ [dyn/cm] é a tensão superficial do líquido, μ_L[cp] é a viscosidade dinâmica do líquido, ρ_a [g/cm^3] a massa específica do meio circundante (assumido gasoso e quiescente), ρ_L[g/cm^3] a massa específica do líquido, U [cm/s] a velocidade do líquido na folha cônica e k uma constante obtida escolhendo uma relação hiperbólica entre a espessura de folha, h, e o tempo, t, i.e., ht = k . Para uma folha plana, a espessura em qualquer seção distante y a partir do ponto de injeção foi também admitida por Dombrowski e Johns (1963) como sendo $h = K_1/y$, onde K_1 é uma constante.

Aqui, para uma folha cônica, a espessura em qualquer seção é considerada como sendo $h = K_1/X$, onde X é a coordenada ao longo da folha medida a partir do ponto de encontro dos jatos. Dombrowski e Johns usaram $K_2 = ht$, onde K_2 é uma constante e t o tempo. Assim,

$$K_2 = \frac{K_1 t}{X} = \frac{K_1}{U} . \qquad (2)$$

A folha se desenvolve tal que $hX = K_1$ = constante. A única maneira pela qual isto pode acontecer é que, em qualquer posição $X = n\, h_i$ (onde n é qualquer número positivo e h_i é a espessura inicial do filme líquido próximo ao vértice do cone), a espessura da folha seja igual a h_i/n. Assim,

$$K_1 = \frac{h_i}{n}\, n\, h_i = h_i^2 \qquad (3)$$

e

$$K_2 = \frac{h_i^2}{U} . \qquad (4)$$

Wang e Lefebvre (1987) mostraram que, para o caso de atomizadores tipo "pressure swirl", a espessura inicial, h_i, pode ser facilmente relacionada com a espessura do filme dentro do orifício de descarga, h_0, pela expressão $h_i = h_0 \cos\theta$, onde θ é o semi-ângulo do cone. Para o cáso incompressível, Wang e Lefebvre indicaram que $U = U_0/\cos\theta$, onde U_0 é a velocidade do líquido na seção de saída do atomizador. No presente caso de N jatos colidentes não coplanares de diâmetro d_0, as mesmas relações podem ser aplicadas, apenas que agora h_0 é a espessura de filme no ponto de colisão dos N jatos e U e U_0 são as velocidades do líquido na folha e nos jatos (assumidas como iguais em módulo), respectivamente. Em consequência,

$$K_2 = \frac{h_0^2 \cos^3\theta}{U_0} . \qquad (5)$$

A espessura do filme no ponto de encontro dos N jatos, h_0, pode ser estimada por um simples balanço de massa como

$$h_0 = \sqrt{\frac{N}{4}}\, d_0 , \qquad (6)$$

de tal maneira que

$$K_2 = \frac{N\, d_0^2 \cos^3\theta}{4\, U_0}. \qquad (7)$$

Inserindo a Eq. (7) na equação derivada por Dombrowski e Johns para o diâmetro de ligamento em uma folha plana (Eq. (1), usando K_2 em vez de k), a seguinte equação é obtida para o atomizador de N jatos:

$$d_L = 0.962 \cos\theta \left(\frac{N^2 d_0^4 \sigma^2 \cos^6\theta}{16 \rho_a \rho_L U_0^4} \right)^{\frac{1}{6}} \times \left(1 + 2.6\, \mu \cos\theta \sqrt[3]{\frac{N\, d_0^2 \rho_a^4\, U_0^7}{288\, \rho_L^2\, \sigma^5}} \right)^{\frac{1}{5}}. \qquad (8)$$

Assumindo que o colapso de um ligamento produza uma gota de diâmetro d_d, de acordo com mecanismo proposto por Rayleigh (1878), pode-se escrever:

$$d_d = 1.89\, d_L\ . \qquad (9)$$

O número de escoamento, FN, pode ser escrito como

$$FN = \frac{\dot{m}}{\sqrt{\rho_L \Delta p_L}} \quad \left[m^2 \right] \qquad (10)$$

onde $\dot{m}$ é a vazão mássica do líquido e Δp_L o diferencial de pressão do atomizador.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com as derivações do item anterior, a Eq. (8) pode ser introduzida na Eq. (9), produzindo os resultados apresentados nas Figuras 3-12 para óleo diesel DF-2 (μ_L=2.61 cp, σ=27.0 dyn/cm e ρ_L=0.86 g/cm^3), água (μ_L=1cp, σ=73.4 dyn/cm e ρ_L=1 g/cm^3), etanol (μ_L=1.2 cp, σ=22.75 dyn/cm e ρ_L=.791 g/cm^3), querosene (μ_L=1.6 cp, σ=26.0 dyn/cm e ρ_L=0.80 g/cm^3) e óleo combustível pesado a 366K (μ_L=37.0 cp, σ=21.0 dyn/cm e ρ_L=0.96 g/cm^3), respectivamente, todos para N = 3. São plotados valores de diâmetro de gota como função da vazão mássica para diferentes valores de Δp_L e FN para ângulos de cone de 60° e 90°.

Comparando os resultados obtidos com água, etanol e querosene, que possuem viscosidades próximas, pode-se observar a forte influência da tensão superficial que, para os três líquidos, é maior para a água. Quanto maior a tensão superficial, maior o tamanho das gotas formadas, o que é consistente com a prática.

Comparando os resultados obtidos com óleo combustível pesado, etanol e querosene, que possuem tensões superficiais próximas, pode-se observar a forte influência da viscosidade, que é muito maior para o óleo combustível. Quanto maior a viscosidade, maior o tamanho das gotas formada, o que também é consistente com a prática.

Deve-se mencionar que por se tratar de uma área estratégica não se encontram dados experimentais na literatura para que se possa avaliar a correção da teoria. Entretanto tal teoria foi aplicada em atomizadores do tipo "fan Spray", "Y-jet" e "pressure swirl", sendo que em todos esses tipos de atomizadores a mesma concordou notavelmente com dados experimentais disponíveis. No caso do atomizador tipo "Y-jet"os dados foram medidos na BYU (Brigham Young University) situada em Provo EUA, e um trabalho foi submetido para publicação na revista Atomization and Sprays. No caso do atomizador tipo "pressure swirl", os dados comparativos foram obtidos da literatura, principalmente do trabalho de Wang e Lefebvre (1987), e outro trabalho foi submetido para publicação na revista Journall of Propulsion and Power.

Para finalizar, deve-se mencionar que o ângulo de cone de 90° produziu gotas menores do que o ângulo de 60°, para três jatos impingentes, para todos os líquidos investigados.

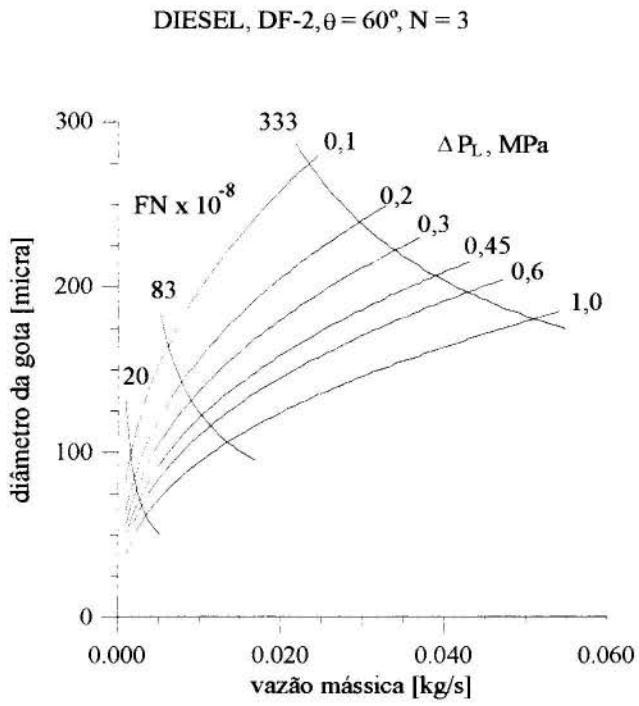


Figura 3 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (diesel, DF-2, θ = 60°, N = 3).

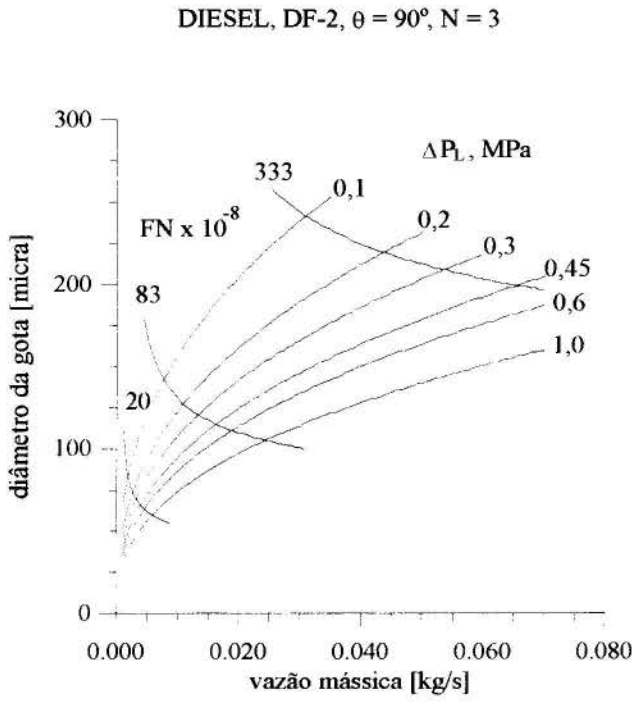


Figura 4 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (diesel, DF-2, θ = 90°, N = 3).

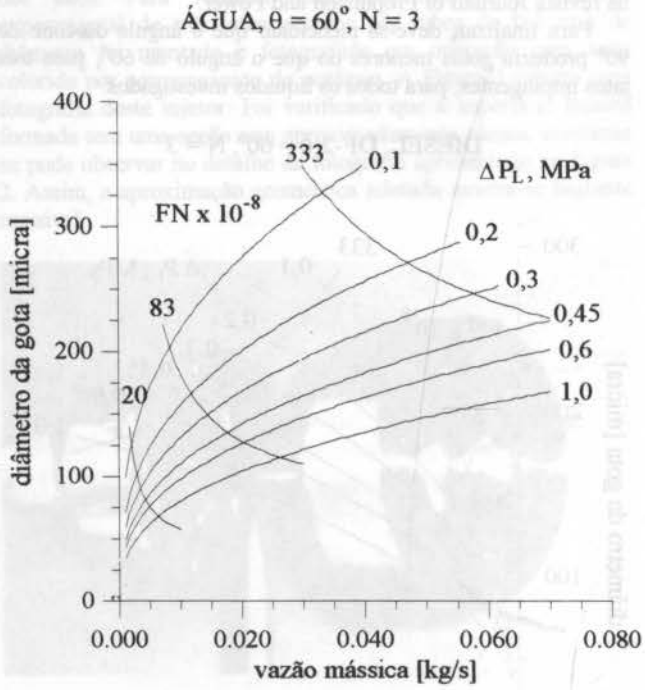


Figura 5 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (água, θ = 60°, N = 3).

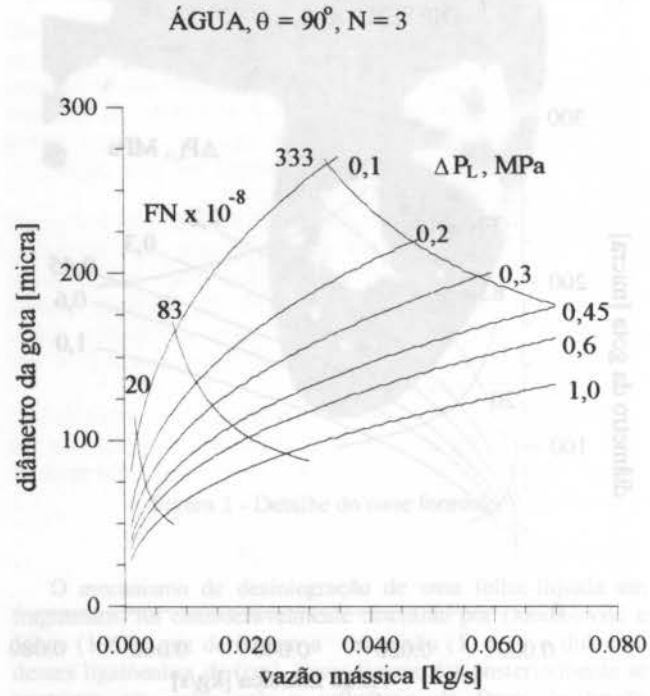


Figura 6 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (água, θ = 90°, N = 3).

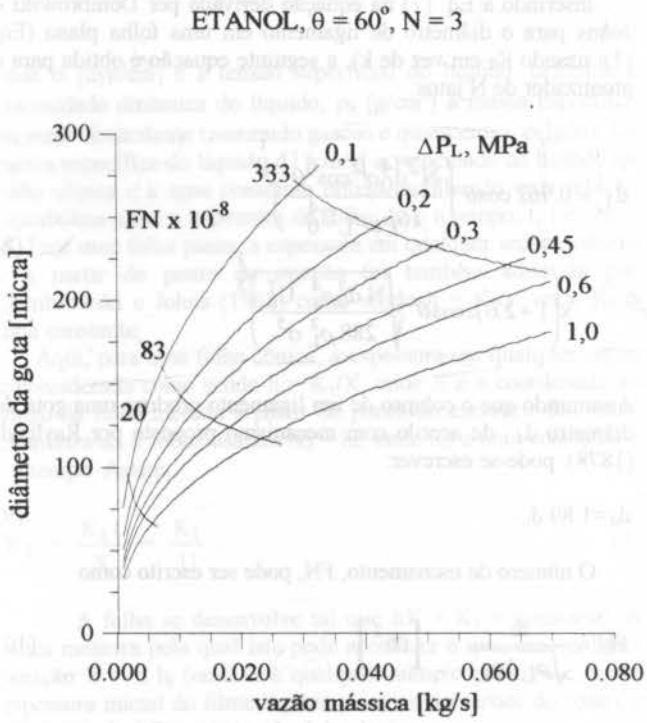


Figura 7 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (etanol, θ = 60°, N = 3).

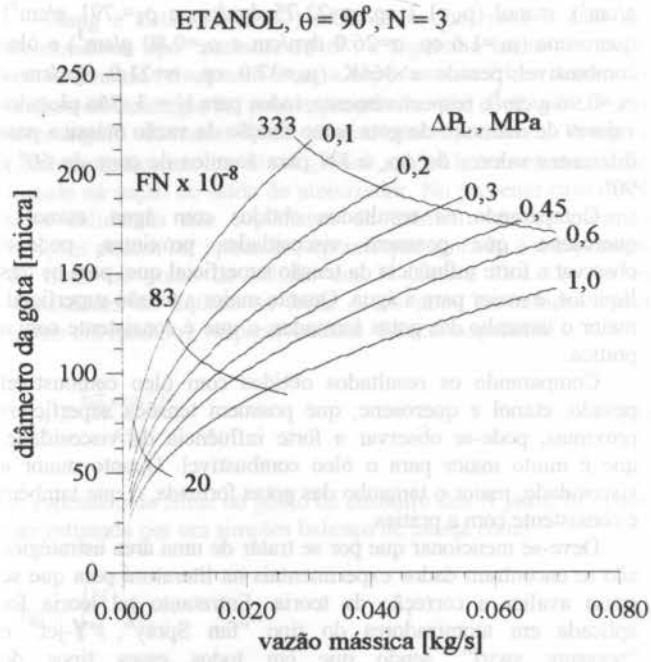


Figura 8 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (etanol, θ = 90°, N = 3).

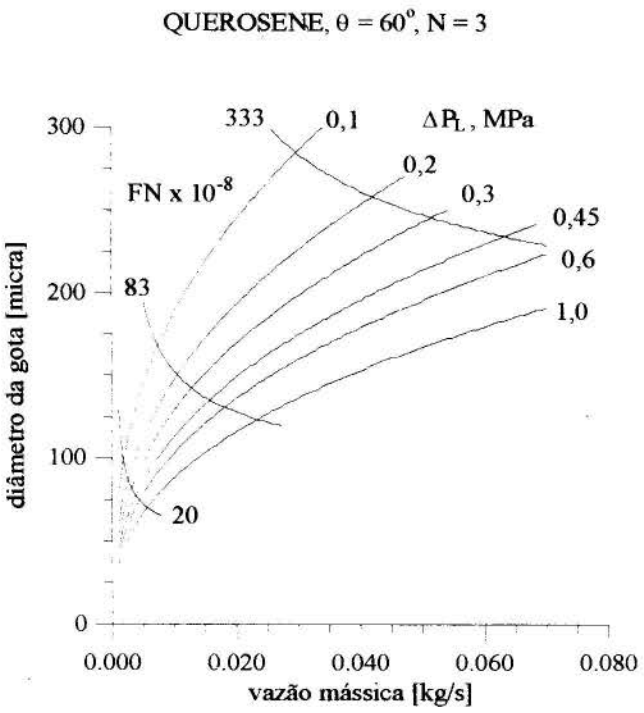


Figura 9 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (querosene, θ = 60°, N = 3).

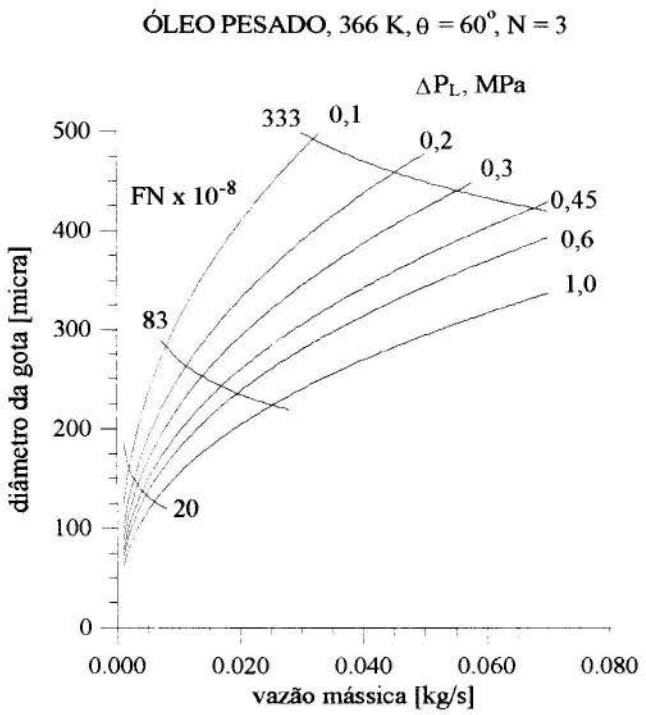


Figura 11 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (óleo combustível pesado, θ = 60°, N = 3).

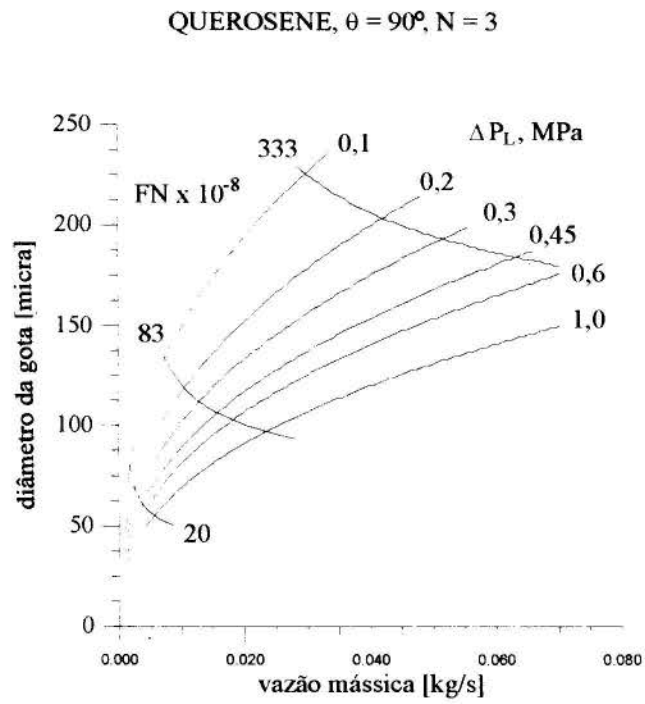


Figura 10 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (querosene, θ = 90°, N = 3).

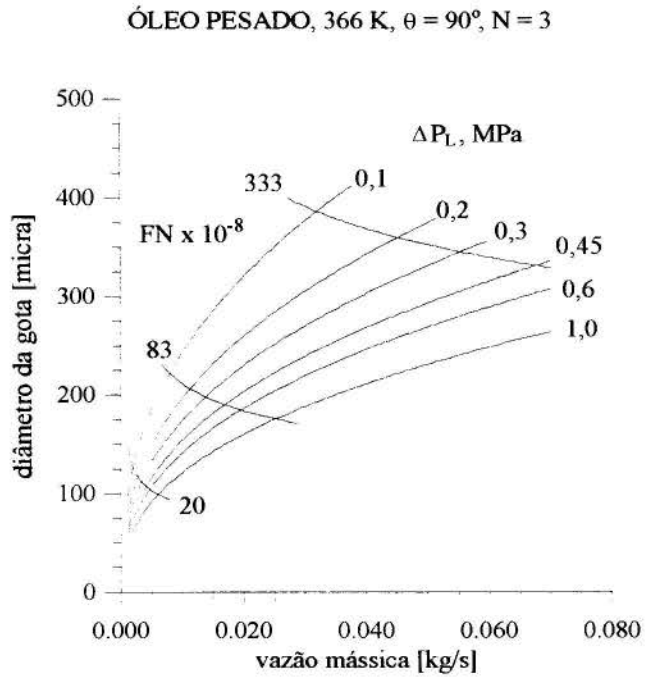


Figura 12 - Diâmetro médio da gota como função da vazão mássica (óleo combustível pesado, θ = 90°, N = 3).

CONCLUSÕES

Uma formulação teórica para calcular diâmetros médios de gota, baseada na hipótese de Dombrowski e Johns (1963) com relação à espessura de uma folha plana de líquido, foi derivada para atomizadores de jatos múltiplos. Baseando-se em observações visuais de um spray obtido por três jatos colidentes, uma superfície cônica foi assumida como a superfície líquida formada, a partir da qual o líquido é desintegrado e o spray é gerado. A formulação considera parâmetros geométricos do atomizador bem como parâmetros físicos do gás de atomização e do líquido.

Quanto maior o número de jatos colidentes, melhor será a aproximação por um cone. Embora não se tenha dados experimentais que corroborem a formulação desenvolvida, seus resultados qualitativos estão de acordo com as variações esperadas em função da tensão superficial e da viscosidade dos fluidos empregados na simulação. A verificação experimental da correlação desenvolvida será feita a posteriori em um próximo trabalho.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo apoio concedido para manter o Dr. Heraldo da Silva Couto como Professor Visitante no Departamento de Energia da Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, através do auxílio número 95/0455-8. Os autores também agradecem as inestimáveis discussões e sugestões do Dr. Leon Sinay e a colaboração do Eng. Wilson de Freitas Muniz, ambos do Laboratório Associado de Combustão e Propulsão do INPE.

REFERÊNCIAS

Couto, H.S. and Bastos-Netto, D., "Modeling droplet size distribution from impinging jets", J. Propulsion and Power, 7(4):654-656, 1991.

Couto, H.S., Bastos-Netto, D., and Migueis, C.E.S.S., "Modeling of the initial droplet size distribution function in the spray formed by impinging jets", J. Propulsion and Power, 8(3):725-727, 1992a.

Couto, H.S., Migueis, C.E.S.S. and Bastos-Netto, D., "Theory and design technique for a splash plate atomizer", Anais do IV Encontro Nacional de Ciências Térmicas, pp. 57-58, 1992b.

Dombrowski, N. and Johns, W.R., "The aerodynamic instability and disintegration of viscous liquid sheets". Chemical Engineering Science, 18:203-214, 1963.

Hagerty, W.W. and Shea J.F., "A study of the stability of plane fluid sheets". J. Appl. Mech., 22(4):509-514, 1955.

Fraser, R.P., Eisenklam, P., Dombrowski, N. and Hasson, D., "Drop formation from rapidly moving liquid sheets", AIChE Journal, 8(5):672-680, 1962.

Lefebvre, A.H., "Atomization and sprays", Hemisphere Publishing Corporation, New York, 1989.

Queiroz, L.C., "Determinação experimental do diâmetro médio local das gotas de um spray de um injetor do tipo jatos colidentes", Dissertação de Mestrado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, Cachoeira Paulista, SP, 1992.

Rayleigh, Lord, On the instability of jets, Proc. London Math. Soc., 10:4-13, 1878.

Squire, H.B., "Investigation of the instability of a moving liquid film", British Journal of Applied Physics, 4:167-169, 1953.

Wang, X.F. and Lefebvre, A.H., "Mean drop sizes from pressure-swirl nozzles", J. Propulsion and Power, .3(1):11-18, 1987.

ABCM

HIGH PRESSURE DROPLET BURNING EXPERIMENTS IN REDUCED GRAVITY

B. Vieille, C. Chauveau, A.Odeïde and I. Gökalp
Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs
Centre National de la Recherche Scientifique
45071 Orléans cedex 2 - France

SUMMARY

High pressure droplet burning characteristics of five fuels are investigated under normal and reduced gravity conditions. Subcritical and supercritical droplet burning regimes are explored. The experimental results show that the droplet burning lifetime decreases strongly with increasing pressure in the subcritical regime. When the pressure exceeds the critical pressure of the pure liquid, the droplet burning lifetimes remain constant. Therefore, the minimum burning time observed in the literature is not confirmed here. In order to take into account the residual gravity enhanced natural convection effects, a correction based on the Grashof number is applied. This correction allows a comparison of experiments under different gravity and pressure conditions and an estimation of the true value of the burning time, i.e. without any convection effect.

INTRODUCTION

Depending on the surrounding flow and thermodynamic conditions, a single droplet may experience several gasification regimes, ranging from the envelope flame regime to pure vaporization as noticed by Chauveau et al. (1993). The characteristic times of droplet gasification are largely influenced by the surrounding pressure and temperature. Gasification of liquid droplets under high pressure conditions is indeed one of the main phenomena characterizing liquid fueled energy systems. It is also conjectured that droplets initially injected in the high pressure combustion chamber under subcritical temperatures may heat up and attain the supercritical thermodynamic state before their total gasification. Many theoretical and computational studies have addressed sub- and supercritical droplet vaporization phenomena under spherical symmetry or axisymmetric conditions, by solving the conservation equations associated with the problem. Most of the contributions take into account the transitory effects, the thermodynamic non-idealities and the ambient gas solubility in the liquid phase due to high pressures. Some new approaches based on molecular dynamics are also emerging as in Long et al. (1994).

A parametric investigation of single droplet gasification regimes is therefore helpful in providing the necessary physical ideas for sub-grid models used in spray combustion numerical prediction codes. A research program has been initiated at the LCSR to explore the vaporization regimes of single and interacting hydrocarbon as in Chauveau et al. (1993) and liquid oxygen droplets as in Chesneau et al. (1994) under high pressure conditions. The research program also includes the investigation of single and interacting droplets vaporizing in laminar or turbulent, isothermal or heated flows as in Gökalp et al. (1992). In parallel to pure liquid droplet studies, bicomponent hydrocarbon droplets are also investigated in Gökalp et al. (1994). Droplet interaction effects are also explored for the configuration of three droplets in tandem vaporizing in a laminar heated flow in Ramos-Arroyo et al. (1994). Reduced gravity studies are conducted to reproduce spherical symmetry conditions essentially for burning droplet studies as shown in Chauveau et al. (1993) and in Chauveau et al. (1995).

This paper summarizes the status of the LCSR program on the high pressure burning of single fuel droplets ; recent results obtained under normal and reduced gravity conditions with suspended droplets are presented. In the work described here, parabolic flight of the CNES Caravelle is used to create a reduced gravity environment of the order of 10^{-2} g_0. For all the droplet burning experiments reported here, the suspended droplet initial diameters are scattered around 1.5 mm and the ambient air temperature is 300 K. The ambient pressure is varied between 0.1 and 12 MPa. Five fuels are investigated : methanol (P_{cr} = 7.9 MPa), ethanol (P_{cr} = 6.39 MPa), n-heptane (P_{cr} = 2.74 MPa), n-hexane (P_{cr} = 3.01 MPa) and n-octane (P_{cr} = 2.48 Mpa) where P_{cr} is the critical pressure.

DESCRIPTION OF THE EXPERIMENTAL TECHNIQUES

High pressure droplet gasification facility. Droplet gasification experiments under stagnant and variable pressure conditions are performed in a specially designed facility : High Pressure Droplet Gasification Facility (HP-DGF). The HP-DGF is designed to investigate the gasification regimes of suspended or free-floating droplets under variable pressure conditions, up to 12 MPa. Low pressure droplet burning experiments can also be performed. This facility can be used during the parabolic flights of an aircraft. This apparatus has been fully described previously in Chauveau et al. (1993). For high pressure droplet burning experiments, an improved version of the injection system and two heated coils for ignition are used. The coils are located about 15 droplet diameters below and above the suspending fiber and are used to heat the air in the vicinity of the droplet. The coils heating current is shut down when droplet autoignition is attained. The sequence of injection and ignition operations is computer controlled. The results presented in this paper are obtained with droplets suspended on a quartz fiber of 0.2 mm with an enlarged extremity of 0.4 mm diameter.

Diagnostics. The principle diagnostic systems we are using are based on the visualization of the droplet burning phenomena. Suspended droplets are backlighted ; this provides the necessary contrast for direct threshold definition. The recording equipment is based on the high speed video camera, Kodak-Ektapro 1000, which can record up to 1000 full frames per second and allows detailed analysis of droplet burning. The Ektapro 1000 Motion Analyzer's live, real-time viewing makes possible to follow the investigated phenomena frame by frame. A second camera has been added to the Kodak-Ektapro 1000 system to allow simultaneous observations of the droplet and the flame with appropriate magnification rates. The digitized images from the Ektapro system are transferred to a microcomputer where the image analyses are performed. For the details of the image

analysis, Chauveau et al. (1993) and Chesneau et al. (1994) can be consulted.

RESULTS AND DISCUSSION

Burning droplet experiments have been conducted both under normal gravity and under reduced gravity conditions. An example of the residual gravity level recorded during a parabolic flight experiment is given in figure 1. The figure shows the time variation of the gravity level synchronized with the camera acquisition, during the 20 seconds of the microgravity period. On this sequence, the average gravity level corresponding to the actual droplet burning time (0.69 s for a n-octane droplet burning at 8 MPa) is $2\ 10^{-2}\ g_0$.

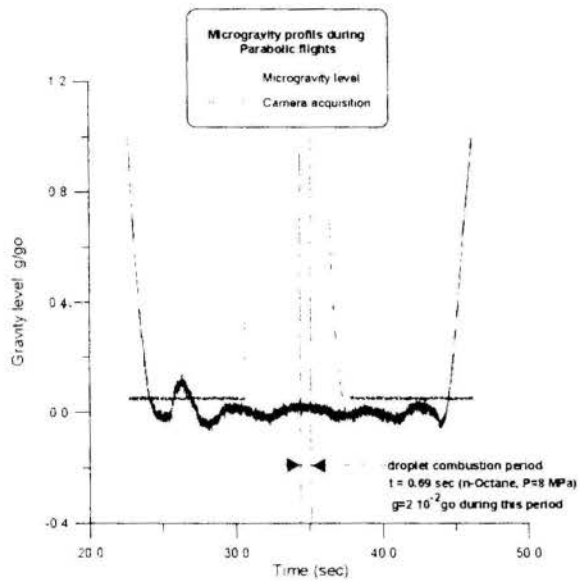


Figure 1 : Typical microgravity level versus time during a parabolic flight

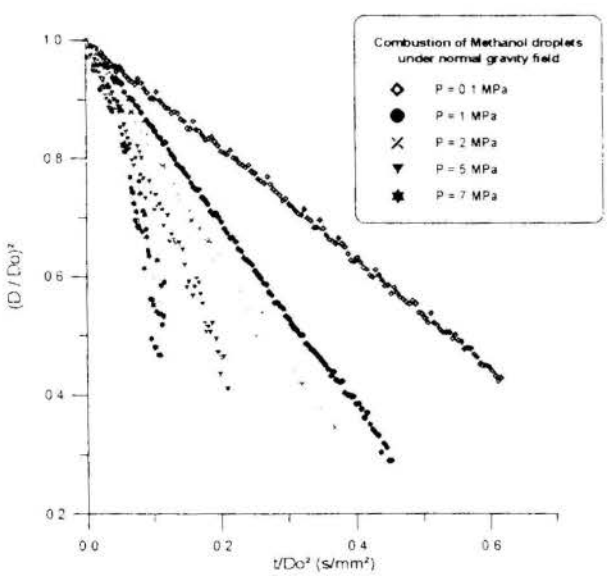


Figure 2 : Evolution of the normalized squared droplet diameter versus normalized time

Figure 2 presents the time histories of the normalized squared droplet diameter versus normalized time for methanol droplets burning under normal gravity. The weakly sooting behavior of methanol droplets allows the observation of the droplet dimensions during the entire burning period. For the reduced pressure range explored here ($P_r = P / P_{cr}$ up to 0.9), the droplet projected surface area regresses quasi-linearly with time as expected from the D^2 law allowing the determination of an average burning rate K as $K = - d(D^2)/dt$.

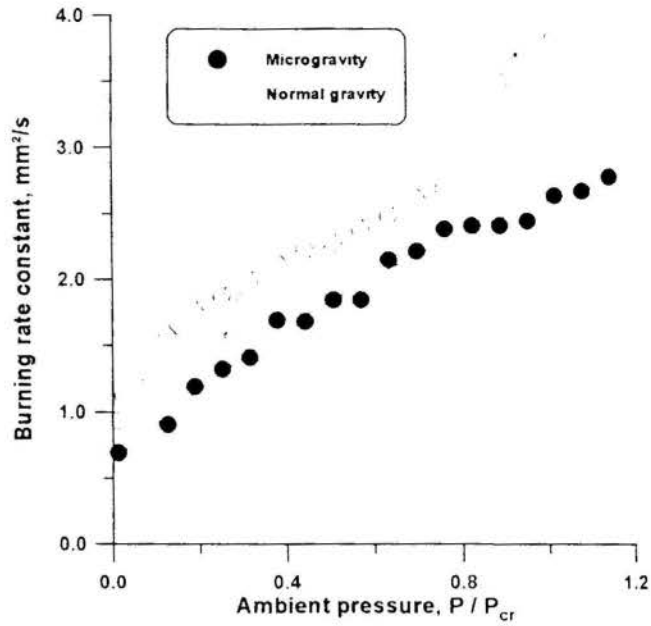


Figure 3 : Evolution of the burning rate constant versus normalized pressure with methanol droplets

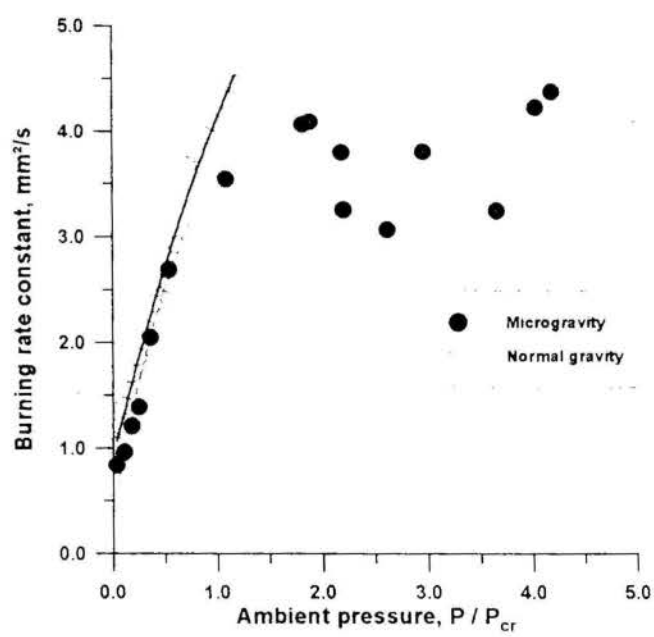


Figure 4 : Evolution of the burning rate constant versus normalized pressure with n-heptane droplets

The average burning rates determined under normal and reduced gravity are compared in figure 3 for a pressure range extending up to $P_r = 1.15$. As expected, the reduced gravity K values are lower than the normal gravity values; both increase continuously with pressure. The strong increase of K with pressure above $P_r = 0.8$ under normal gravity remains unexplained. The results obtained with n-heptane droplets are shown on figure 4. As the critical pressure of n-heptane is lower, P_r values larger than 4 are obtained in the experiments in

microgravity. The lowering of the pressure effect above the critical pressure is clearly observed.

The results obtained in microgravity with the four fuels tested are shown in figure 5. In this figure, the burning rate at a given pressure is normalized by its value at the critical pressure K_{pc}. The scattering of the experimental values become significant for high pressures, while a single behaviour characterizes the subcritical domain.

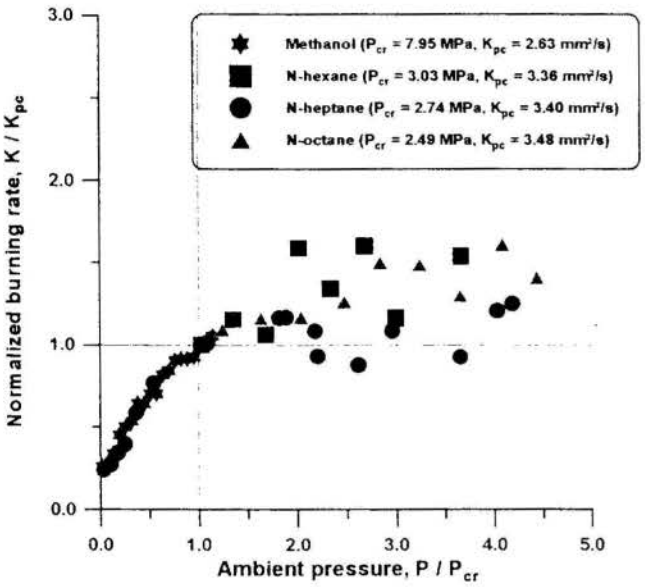


Figure 5 : Evolution of the normalized burning rate constant versus normalized pressure

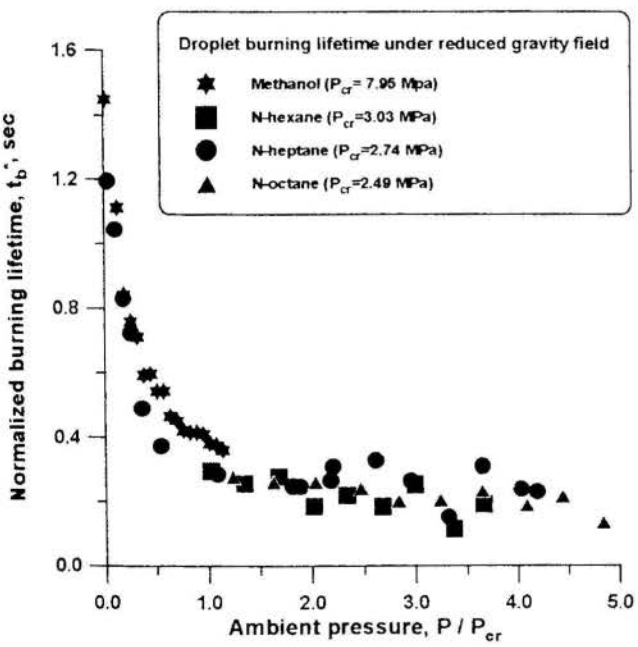


Figure 6 : Evolution of the normalized burning life time versus normalized pressure

An interesting feature of these results is that we did not observe a maximum burning rate around the critical pressure, as was observed by Sato (1993). Figure 6 shows the corresponding burning times for a droplet of 1 mm initial diameter t_b^* versus the reduced pressure. The subcritical domain is characterized by a strong decrease of the burning time, which seems to be stabilized during the whole supercritical domain. In Sato (1993), a minimum of the burning time near the critical pressure was clearly observed. The main differences between the two experiments are related to the reduced gravity levels : the experiments of Sato (1993) were conducted by using drop towers, where the residual gravity level is much less. The increase of the burning time observed in Sato (1993) in the supercritical domain can be explained by the onset of a diffusion controlled regime after the vanishing of the gas-liquid interface. In the present experiments, the residual gravity induced natural convection is enhanced with increasing pressure : also in the supercritical domain, the reduction of the surface tension makes the dense gas phase much more sensible to convection effects. All together these two effects may therefore explain the present experimental observations.

In order to quantify the effects of natural convection on high pressure droplet burning, a correction based on the Grashof number is introduced. The use of this correction would allow the comparison of various experiments with different fuels and different reduced gravity levels. Moreover, it could yield a true burning rate without buoyancy effects. The correction factor is constructed by using the classical work on the influence of natural convection from Sato (1993) and Ranz and Marshall (1952) and therefore the correlation

$$K = K_0 (1 + A \, Pr^{1/3} \, Gr^{1/4})$$

is adopted, where K is the experimentally measured burning rate, K_0 is the burning rate without natural convection effects, Pr is the Prandtl number, Gr is the Grashof number and A is a coefficient. By comparing all the experimental results for the fuels investigated under different gravity levels, the value A is found to be equal to 0.05.

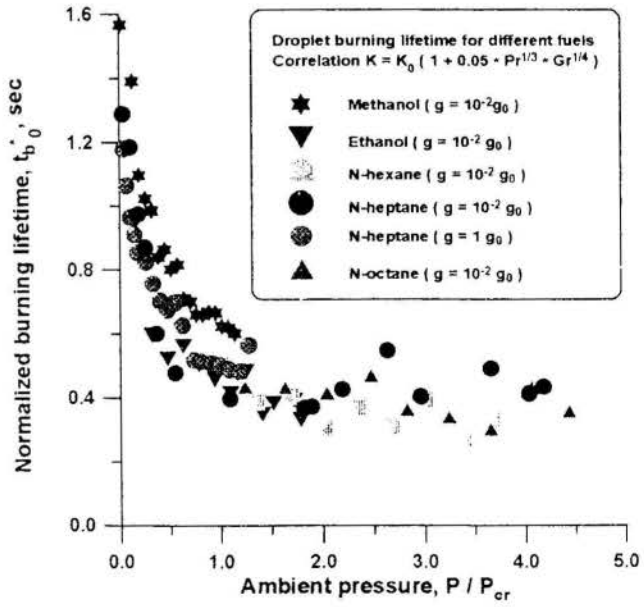


Figure 7 : Normalized burning lifetime corrected versus normalized pressure

The Grashof number is defined as $Gr = (g \, d^3 \, \rho^2 / \mu^2) (\Delta T / T)$, where T is the arithmetic mean temperature between flame and ambient temperatures and ΔT the difference between these two temperatures. For the characteristic length d, considering that buoyancy effects are more effective on the flame region, we use the flame diameter instead of the droplet diameter as in Law et al. (1972).

Moreover, this dimension is the only one which undergoes pressure effects. Results of Sato et al. (1990) are used to introduce this effect. The whole explanation for the calculation of the correlation is in Vieille et al. (1996).

Figure 7 presents the burning lifetimes evaluated for 1 mm droplet initial diameter for various fuels and corrected by the above correction factor $t_{b\,0}^{*}$. Figure 8 presents a comparison between the present work and those of Sato et al.(1990) and Kadota et al. (1981). The minimum droplet burning lifetime observed in Sato (1993) does not appear even when this correction is applied to the present experiments. In the subcritical regime, the reduction of the burning lifetime with increasing pressure under zero convection conditions can be characterized by a power law proportional to $p^{-0.37}$, therefore close to the prediction of Spalding (1959).

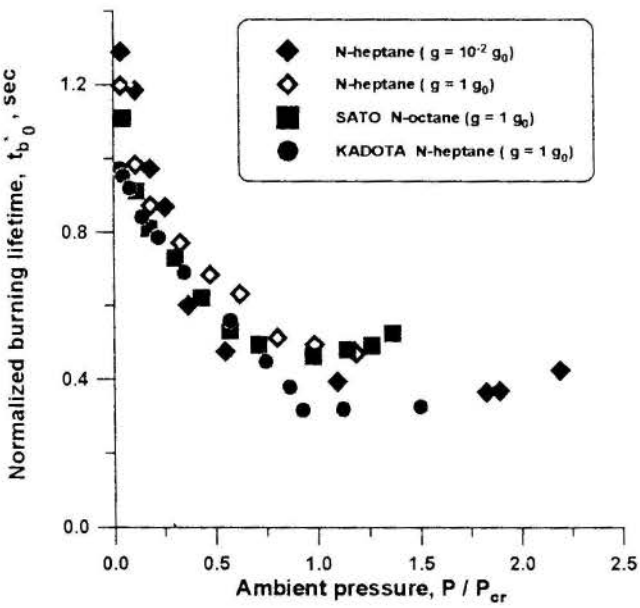


Figure 8 : Comparison of our study with others authors

SUMMARY AND FUTURE WORK

In the work described here, emphasis is put on recent results obtained in high pressure droplet burning experiments conducted both under normal gravity and during the parabolic flights of the CNES Caravelle which creates a reduced gravity environment of the order of 10^{-2} g_0. The combination of high pressure droplet burning experiments with reduced gravity is crucial in order to reduce the pressure enhanced natural convection effects and also to extend the applicability of the fibre suspended droplet technique when the surface tension decreases due to the closeness of thermodynamic critical conditions. The experimental results presented in this paper show a decrease of the droplet burning time with pressure in the subcritical domain. The minimum burning time observed by other investigators around the critical pressure was not found in this study for the four fuels investigated. This may be attributed to the pressure enhanced natural convection effects due to the residual gravity during parabolic flight experiments.

The investigation of high pressure effects will continue to be the main focus of a future LCSR work on droplet gasification. The supercritical regime will be approached in the pure vaporization experiments with the help of a new version of the HP-DGF which is under construction and will allow to increase the temperature as well as the pressure of the ambient medium. This apparatus will be used to investigate the vaporization and burning of mono and multicomponent fuel droplets in high pressure and high temperature conditions and also to compare normal gravity and reduced gravity experiments to infer natural convection effects. An electrodynamic balance is developed and will be added to the apparatus. It will allow to conduct supercritical vaporization experiments under normal gravity conditions. Parabolic flights will be continued to be used for suspended droplet experiments. A new high pressure droplet burning module will be developed to be used during sounding rocket experiments with ESA.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work is supported by the CNRS/CNES joint research program on "Transport phenomena in reduced gravity" and by the European Space Agency Microgravity Program. The continuous support of CNES (program monitor Dr. B. Zappoli) and of ESA (program monitor Dr. H.U. Walter) is greatly appreciated.

REFERENCES

Chauveau, C., Chesneau, X. and Gökalp, I., 1993, "Burning characteristics of n-heptane droplets under different regimes", *AIAA Paper No. 93-0824*

Chauveau, C., Chesneau, X. and Gökalp, I., 1995, "High pressure vaporization and burning of methanol droplets in reduced gravity", *Adv. Space Res.* Vol. 16, No. 7, pp. (7)157-(7)160

Chesneau, X., Chauveau C. and Gökalp, I., 1994, "Experiments on high pressure vaporization of liquid oxygen droplets", *AIAA Paper No. 94-0688*

Gökalp, I., Chauveau, C., Berrekam, H. and Ramos-Arroyo, N.A., 1994, "Vaporization of miscible binary fuel droplets under laminar and turbulent convective conditions", *Atomization and Sprays*, vol. 4, pp. 651-676

Gökalp, I., Chauveau, C., Simon, O. and Chesneau, X., 1992, "Mass transfer from liquid fuel droplets in turbulent flow", *Combust. Flame 89*, 286-298

Law, C.K. and Williams, F.A., 1972, "Kinetics and convection in the combustion of alkane droplets", *Combust. Flame 19*, 393-405

Long, L.N., Micci, M.M. and Wong, B.C., 1994, "Supercritical droplet evaporation modelled using molecular dynamics on parallel processors", paper submitted for presentation at the *30th Joint Propulsion Conference*, Indianapolis, IN, June 27-29

Kadota, T. and Hiroyasu, H., 1981, "Combustion of a fuel droplet in supercritical gaseous environments", *Eighteenth Int. Symp. on Combustion*, 275-282

Ramos-Arroyo, N.A., Chauveau, C. and Gökalp, I., 1994, "An experimental study of three interacting vaporizing fuel droplets in a forced convective laminar flow", presented at *the Sixth ICLASS*, Rouen, also submitted to *Atomization and Sprays*

Ranz, W.E. and Marshall, W.R. JR, 1952, "Evaporation from drops", *Chem. Eng. Progress 48* : 141-180

Sato, J., 1993, "Studies on droplet evaporation and combustion in high pressures", *AIAA paper 93-0813*

Sato, J., Tsue, M., Niwa, M. and Kono, M., 1990, "Effects of natural convection on high pressure droplet combustion", *Combust. Flame 82* : 142-150

Spalding, D.B., 1959, "Theory of particle combustion at high pressure", *ARS J. 29*, 828-835

Vieille, B., Chauveau, C., Chesneau, X., Odeide, A. and Gökalp, I., 1996, "High pressure droplet burning experiments in reduced gravity", paper accepted for the *Twenty-Sixth Int. Symp. on Combustion*

MODELAGEM DA VAPORIZAÇÃO DE ÁGUA NEBULIZADA EM SISTEMAS DE PROTEÇÃO CONTRA INCÊNDIO

Rubens Romani, Jurandir Itizo Yanagihara
Departamento de Engenharia Mecânica
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo
05508-900, São Paulo, SP, Brasil.

RESUMO

A evaporação de água finamente nebulizada em sistemas de proteção contra incêndio produz um resfriamento maior dos gases de combustão que os convencionais sistemas de sprinklers. Um modelo simplificado para analisar a evaporação de gotículas de um pulverizador que percorrem uma camada de gases de combustão é proposto, a fim de otimizar as dimensões das gotículas para uma extinção mais rápida. O diâmetro de gotícula 200 μ é o que produz maior resfriamento dos gases de combustão para a condição de temperatura da camada de gases de combustão 573 K e espessura 2 m.

INTRODUÇÃO

A fim de proteger vidas e propriedades contra incêndios, os sistemas de sprinklers são instalados em prédios comerciais, residenciais e em edificações industriais. Atualmente, os sistemas de sprinklers estão amplamente difundidos, isto devido ao fato de que a água mais do que qualquer outro agente extintor é abundante na natureza, não é tóxica e não causa problemas no meio ambiente. Os sistemas de sprinklers tem diminuído os custos com seguros e os riscos de incêndio, mas algumas vezes podem não atuar rapidamente e evitar que o incêndio se torne incontrolável.

O resfriamento dos gases de combustão pela vaporização de gotículas de água finamente nebulizada parece ser um mecanismo promissor no combate a incêndio. A utilização de água finamente nebulizada na extinção de incêndios possui vantagens em relação aos convencionais sistemas de sprinklers e de spray de baixa pressão. O tempo de extinção do incêndio e a quantidade de água consumida são menores com a utilização do sistema de água finamente nebulizada. A água finamente nebulizada produz um resfriamento maior da camada de gases de combustão, reduzindo a reirradiação de calor para o objeto em chamas e outros objetos da sala, evitando assim, uma rápida propagação do incêndio.

O vapor produzido pelo sistema de água nebulizada poderá se condensar como resfriamento dos gases de combustão, que perdem calor para as paredes da sala e para o ar externo ao se misturar com este. Entretanto, a condensação desse vapor em nada prejudica o processo de combate a incêndio pelo sistema de água finamente nebulizada.

O único efeito negativo do sistema de água finamente nebulizada é que com o resfriamento maior dos gases de combustão, estes sofrerão forças de empuxo menores, levando um tempo maior para sairem pelas aberturas da sala. Com isto, a concentração de gases dentro da sala tenderá a ser maior, o que aumenta a possibilidade de intoxicação.

A água finamente nebulizada pode ser produzida utilizando-se bombas de alta pressão e bicos pulverizadores de geometria adequada (diâmetro do orifício < 1 mm).

Os mecanismos principais para extinção mais rápida do incêndio com a água finamente nebulizada são: 1) remoção maior de calor através da vaporização da névoa de água; 2) separação entre o oxigênio e o combustível pela presença da névoa de água; 3) atenuação da radiação térmica para o combustível através da formação da névoa de água, que funciona como uma blindagem de radiação. Outros efeitos secundários da água finamente nebulizada na extinção do incêndio são a diluição da mistura ar-vapor combustível e a redução da velocidade da frente de chama através de mudanças na cinética de reação.

Rasbash (1960), analisou a influência da água nebulizada no combate a incêndio, verificando que com a utilização de água nebulizada com gotículas de diâmetro menor, o tempo de extinção do incêndio era reduzido. Verificou também, que ao resfriar a temperatura do combustível abaixo do ponto de fulgor, a chama se extingue. Mawhinneyet et al. (1994), analisou a influência de água nebulizada no combate a incêndio em diversos combustíveis, verificando que o desempenho da água nebulizada é muito bom para combustíveis onde o resfriamento devido a vaporização da água resulta em temperaturas do combustível abaixo do ponto de fulgor, como é o caso do óleo diesel (ponto de fulgor 60 ^{0}C), mas não satisfatório para o heptano (ponto de fulgor -4 ^{0}C). Segundo Mawhinneyet et al. (1994) ,considerações teóricas sugerem que a reação de combustão na chama de difusão irá cessar quando a temperatura da chama cai abaixo de aproximadamente 1600 K. Boysan et al. (1982) desenvolveu um modelo para a vaporização de gotículas de combustível em turbinas a gás. Chow (1989a) utilizou o modelo desenvolvido por Boysan et al. (1982) para fazer uma modelagem da evaporação de gotículas em um bico de sprinkler durante um incêndio.

O objetivo deste trabalho é apresentar uma modelagem da vaporização das gotículas de um pulverizador com diâmetro do orifício menor que 1 mm, durante o percurso dentro da camada de gases de combustão, fazendo uma análise para avaliar a influência dos diversos parâmetros.

MODELO MATEMÁTICO

Consideremos um bico pulverizador fora da pluma de um objeto em chamas em uma sala conforme mostrado na figura 1. Após um intervalo de tempo Δt_1 do início da ignição, uma camada de gases quentes de combustão se forma sob o teto. Após um intervalo de tempo Δt_2, o bico pulverizador atua, descarregando água a uma vazão constante. A descarga de água do bico pulverizador forma um cone circular cheio e uniforme. Neste cenário de incêndio, um modelo bidimensional poderá ser utilizado devido a simetria existente. As gotículas com diâmetro inicial D_{oi}, movem-se com uma velocidade U_p, cujas componentes são u_{pi} e v_{pi}. Ao mesmo tempo em que as gotículas são aceleradas pela gravidade, surgem forças de arrasto nas gotículas, enquanto elas percorrem a camada de gases de combustão. As gotículas de água são aquecidas pela camada de gases. Quando a temperatura superficial das gotículas

alcança o ponto de ebulição, inicia-se a vaporização e o diâmetro das gotículas começa a diminuir.

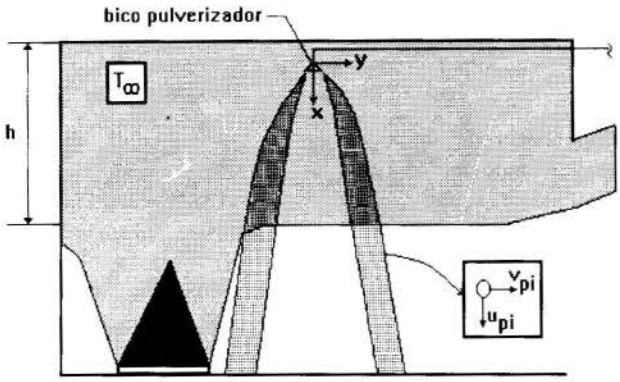


Figura 1: Descarga de um pulverizador durante um incêndio.

A extinção de um incêndio por água nebulizada é extremamente complicada, envolvendo processos bifásicos, turbulentos, tri-dimensionais em regime transitório, onde atuam forças de empuxo nos gases. O modelo apresentado não procura simular o processo de extinção do incêndio com água nebulizada, descreve somente a interação entre as gotículas e a camada de gases de combustão, avaliando a vaporização das gotículas durante o percurso pela camada.

Todo esse processo complexo de vaporização de gotículas foi modelado por Chow (1989a, 1989b), considerando as seguintes hipóteses:

- A camada de gases de combustão é considerada um reservatório térmico com espessura e temperatura constantes;
- As gotículas são aproximadas por esferas no cálculo do calor trocado com a camada de gases de combustão e no cálculo das forças de arrasto;
- As gotículas não colidem umas com as outras durante o percurso pela camada de gases de combustão;
- As gotículas não coalescem formando gotículas maiores durante o percurso pela camada de gases de combustão;
- Durante a vaporização de uma gotícula, a área superficial da gotícula (ou o diâmetro ao quadrado D^2) é proporcional ao tempo;
- A distribuição de temperatura na gotícula é quase uniforme, podendo-se desprezar a condução interna a gotícula;
- A taxa de evaporação é pequena, de forma que ocorre em um regime quase-permanente (Spalding, 1953).

É importante ressaltar que o modelo se aplica apenas para pulverizadores fora do cone de pluma, onde as gotículas percorrem uma camada de gases de combustão com temperatura aproximadamente constante T_∞. Na região da pluma a temperatura dos gases não é constante.

Acompanhemos o percurso de uma gotícula com diâmetro médio D_m durante o seu percurso pela camada de gases de combustão. As coordenadas (x_i, y_i) da gotícula, em relação ao sistema de coordenadas fixo no pulverizador, podem ser encontradas pela integração das equações:

$$\frac{dx_i}{dt} = u_{pi} \qquad (1)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = v_{pi} \qquad (2)$$

onde u_{pi} é a componente horizontal da velocidade e v_{pi} é a componente vertical da velocidade. As equações da quantidade de movimento na direção y e na direção x fornecem (Kuo,1986) :

$$\frac{\pi}{6}\rho_l . D_l^3 \frac{du_{pi}}{dt} = -\frac{\pi}{8} D_l^2 C_D \left| u_{pi} - u \right| (u_{pi} - u) + F_g \qquad (3)$$

$$\frac{\pi}{6}\rho_l . D_l^3 \frac{dv_{pi}}{dt} = -\frac{\pi}{8} D_l^2 C_D \left| v_{pi} - v \right| (v_{pi} - v) \qquad (4)$$

onde u é a velocidade dos gases de combustão na direção x, v é a velocidade dos gases de combustão na direção y, ρ_l é a densidade da gotícula e C_D é o coeficiente de arrasto. As equações (3) e (4), após manipulação algébrica, resultam em :

$$\frac{du_{pi}}{dt} = -\left(\frac{18.\mu_g}{\rho_l . D_l^2}\right).\left(\frac{C_D . Re}{24}\right).(u_{pi} - u) + g \qquad (5)$$

$$\frac{dv_{pi}}{dt} = -\left(\frac{18.\mu_g}{\rho_l . D_l^2}\right).\left(\frac{C_D . Re}{24}\right).(v_{pi} - v) \qquad (6)$$

onde μ_g é a viscosidade dos gases de combustão e Re o número de Reynolds que é dado por:

$$Re = \frac{\rho_g . D_l}{\mu_g}.(U_p - U_g) \qquad (7)$$

onde U_p é a veloidcade da gotícula com componentes (u_{pi}, v_{pi}) e U_g é a velocidade dos gases de combustão com componentes (u, v). A dependência do número de Reynolds no coeficiente de arrasto é dado por (Lambiris e Combs, 1962):

$$C_D = 27.Re^{-0,84} \qquad 0 < Re < 80 \qquad (8)$$

$$C_D = 0,271.Re^{0,271} \qquad 80 < Re < 10^4 \qquad (9)$$

Sob as condições em estudo o número de Reynolds da gotícula é da ordem de 100 e a correlação acima é adequada.

O aquecimento das gotículas quando entram na camada de gases pode ser expresso por :

$$\frac{dT_l}{dt} = \frac{6.k_g(2 + Re^{1/2} Pr^{1/3})}{\rho_l . D_l^2 . C_{pl}}.(T_\infty - T_l) \qquad (10)$$

onde T_l é a temperatura da gotícula, T_g é a temperatura dos gases de combustão, C_{pl} é o calor específico da gotícula, Pr é o número de Prandtl dos gases de combustão, k_g é a condutividade térmica dos gases de combustão e C_{pg} é o calor específico dos gases de combustão.

O número de Nusselt utilizado na expressão anterior, para transferência de calor entre as gotículas e os gases de combustão foi obtido por Ranz e Marshal (1952) e é dado por :

$$Nu = 2 + 0,6.Re^{1/2}.Pr^{1/3} \qquad (11)$$

Para as gotículas em evaporação, uma equação adicional deduzida por Wise e Agoston (1958) fornece a variação do diâmetro em relação ao tempo e é dada por:

$$\frac{dD_l}{dt} = -\frac{C_b}{2.D_l}(1 + 0,23.Re^{1/2}) \qquad (12)$$

onde o lado direito da equação leva em conta a convecção forçada na evaporação, e a constante C_b é a constante de taxa de

evaporação que depende das propriedades físicas dos gases de combustão e da água e é dada por:

$$C_b = \frac{8.k_g}{\rho_l.C_p}.\ln\left[1+\frac{C_{pg}}{L}.(T_\infty - T_l)\right] \qquad (13)$$

onde C_{pg} é o calor específico dos gases de combustão e L é o calor latente de vaporização da água.

O conjunto das 6 equações diferenciais ordinárias (1), (2), (5), (6), (10) e (12) podem ser usadas para descrever a trajetória, a velocidade, a temperatura e o diâmetro das gotículas de água que caminham dentro da camada de gases. As equações de (1), (2), (5), (6) e (10) são utilizadas até que a temperatura da água atinge o ponto de ebulição (T_l= 373 °K), quando a equação (12) é utilizada e a equação (10) é descartada, pois a temperatura permanece constante durante a evaporação da gotícula. As equações citadas são integradas pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Uma forma de avaliar o calor perdido por evaporação e o calor perdido por convecção em uma gotícula, é considerar um diâmetro médio das gotículas. Assim, considerando um diâmetro médio das gotículas D_m e calculando os valores de x_i, y_i, u_{pi}, v_{pi}, T_l e D_l, a quantidade de calor trocado por evaporação (e) e por convecção (c) em uma gotícula podem, ser avaliadas, como veremos a seguir.

A quantidade de calor perdida por evaporação em uma gotícula cujo diâmetro inicial é D_{ol} pode ser calculada por:

$$e = \frac{\pi}{6}\rho_l(D_{ol}^3 - D_l^3).L \qquad (14)$$

A quantidade de calor perdida por convecção em uma gotícula é:

$$c = \frac{\pi}{6}\rho_l.D_l^3.C_{pl}.\Delta T_l \qquad (15)$$

Para avaliar a troca total de calor por evaporação e a troca total de calor por convecção, basta estimar o número total de gotículas a partir da vazão no pulverizador.

A quantidade de calor perdida por evaporação por unidade de massa em uma gotícula de diâmetro médio inicial D_{ol} é dada por:

$$e_m = \frac{(D_{ol}^3 - D_l^3)}{D_{ol}^3}.L \qquad (16)$$

A quantidade de calor perdida por convecção por unidade de massa em uma gotícula de diâmetro médio inicial D_{ol} é dada por:

$$c_m = C_{pl}.\Delta T_l \qquad (17)$$

O calor total trocado entre os gases de combustão e uma gotícula é a soma do calor trocado por convecção e o calor trocado por evaporação e é dado por:

$$q = e + c \qquad (18)$$

Por unidade de massa, temos:

$$q_m = e_m + c_m \qquad (19)$$

O diâmetro médio das gotículas pode ser estimado conforme Prahl e Wendt, (1988) por:

$$D_m = 3{,}21.We^{1/3}.D_n \qquad (20)$$

onde D_n é o diâmetro do orifício do bico pulverizador e We é o número de Weber que é dado por:

$$We = \rho_l.v_r.\frac{D_l}{\sigma} \qquad (21)$$

onde v_r é a velocidade relativa entre a gotícula e os gases de combustão e σ é a tensão superficial da água.

SIMULAÇÃO E RESULTADOS

O modelo anteriormente descrito foi utilizado para analisar a evaporação de gotículas de um pulverizador localizado dentro de uma sala conforme indicado na figura 1. A temperatura da camada de gases de combustão e a sua espessura durante o incêndio podem ser calculadas por um modelo de zona como o programa FIRST (Mitler e Rocket, 1987). O programa FIRST utiliza um modelo de zona, para calcular a espessura e a temperatura da camada de gases de combustão, taxa de queima de combustível, taxa de calor liberado, concentração de gases de combustão em função do tempo com base em dados de propriedades físico-químicas dos objetos em chamas, geometria da sala, posição dos objetos combustíveis dentro da sala e dimensões e localização de aberturas.

Supondo conhecidos o diâmetro médio das gotículas D_m, a temperatura da camada de gases quentes T_∞, a espessura da camada de gases h e as condições iniciais, podemos resolver o conjunto de equações (1), (2), (5), (6), (10) e (12) para determinar x_i, y_i, u_{pi}, v_{pi}, T_l e D_l para qualquertempo t.

Na simulação, as condições iniciais (t = 0) de uma gotícula de diâmetro médio D_m foram fornecidas: Posição inicial da gotícula: $x_i = 0$, $y_i = 0$; Velocidade inicial da gotícula: $u_{pi} = 0$ (direção vertical), v_{pi} = 3,8 m/s (direção horizontal); Temperatura inicial da gotícula: T_l = 293 K (temperatura ambiente); Velocidade dos gases de combustão: u = 0, v = 0 (gases quase parados na região da camada próxima ao pulverizador). Estes componentes da velocidade dos gases de combustão podem ser calculadas pelo FIRST. Quanto maior a velocidade dos gases de combustão maior a troca de calor com as gotículas de água. O modelo considera a velocidade dos gases de combustão constante em toda a camada.

Para analisar a influência de T_∞, h e D_m, fizemos estes parâmetros variarem da seguinte forma:: o diâmetro médio das gotículas variou de 100 a 1000 μ; a espessura da camada de gases de combustão variou de h = 1m para h=2 m ; a temperatura da camada de gases de combustão variou de T_∞ = 473 K para T_∞ = 573 K.

O conjunto de equações é resolvido até que x_i > h ou até que o diâmetro da gotícula seja zero (evaporação completa da gotícula). Com a mudança dos parâmetros de entrada acima indicados, diferentes trajetórias, velocidades, variações de diâmetro e de temperatura da gotícula são obtidas.

A figura 2 indica a variação da temperatura em função do tempo para camada de gases de combustão com h = 2 m, T_∞ = 573 K e diversos diâmetros médios de gotícula.

Na figura 2, vemos que o aquecimento de gotículas menores é mais rápido. Ao atingir a temperatura de ebulição, as gotículas começam a vaporizar, mantendo a temperatura constante.

A figura 3 indica a variação do diâmetro de uma gotícula ao passar por uma camada de gases de espessura h = 2 m e temperatura T_∞ = 573 K.

A influência da variação da velocidade inicial das gotículas (u_{pi}, v_{pi}) por ser pequena e não foi apresentada.

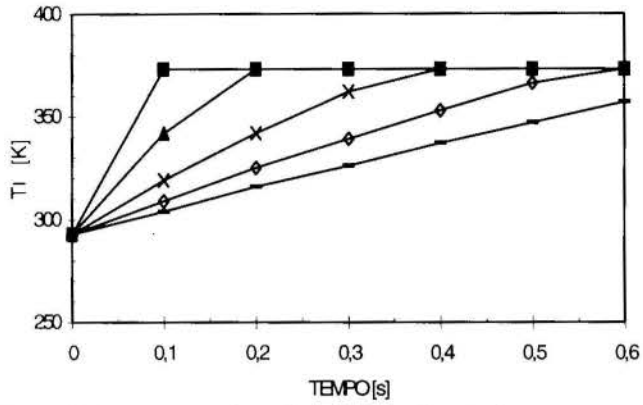


Figura 2: Temperatura da gotícula (T_l) em função do tempo para camada de gases de combustão com h = 2 m, T_∞ = 573K, sendo o diâmetro médio das gotículas: (-) 1,0 mm; (◆) 0,8 mm; (x) 0,6 mm; (Δ) 0,4 mm; (■) 0,2 m m e 0,1 mm.

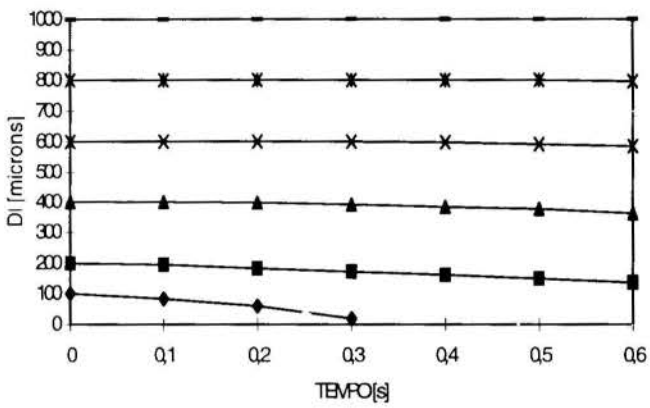


Figura 3: Diâmetro médio da gotícula (D_l) em função do tempo para camada de gases de combustão com h = 2 m, T_∞ = 573K, sendo o diâmetro inicial das gotículas: (-)1,0 mm; (*) 0,8 mm; (x) 0,6 mm; (Δ) 0,4 mm; (■) 0,2 m m.; (◆) 0,1 mm.

Na figura 3, vemos que a gotículas de 1 mm de diâmetro não chegam a vaporizar. Em contrapartida gotículas de 0,1 mm vaporizam-se rapidamente.

Analisando as figuras 2 e 3 acima para a condição h = 2 m, T_∞ = 573 K , verificamos que a vaporização ocorre para gotículas menores que 800 μ. Para gotículas de diâmetro de 800 μ, a vaporização começa a ocorrer quando a gotícula já percorreu quase toda camada de gases de espessura h = 2 m.

Uma vez determinardos x_i, y_i, u_{pi}, v_{pi}, T_l e D_l, podemos calcular o calor trocado por evaporação (e) e por convecção (c) em uma gotícula de diâmetro médio D_m.

As figura 4 e 5 indicam o calor trocado por evaporação (e) e por convecção (c) para 4 condições da camada de gases de combustão: 1) h = 1 m e T_∞ = 473 K; 2) h = 2 m e T_∞ = 473 K; 3) h = 1 m e T_∞= 573 K; 4) h = 2 m e T_∞ = 573 K.

Na figura 4, verificamos que com diâmetros de gotícula menores que 800 μ, a vaporização começa a ocorrer, resfriando a camada de gases de combustão. Entretanto para gotículas muito pequenas a quantidade de calor retirada fica limitada pela pequena massa da gotícula que se vaporiza completamente, como no caso de gotículas de 100 μ.

Na figura 5, vemos que a quantidade de calor retirada por convecção é maior para gotículas maiores devido a sua maior massa. Para analisar qual diâmetro médio de gotícula que retira maior quantidade de calor dos gases de combustão, é necessário construir os gráficos do calor perdido por evaporação, por convecção e total, todos por unidade de massa. Os gráficos do calor perdido por evaporação por unidade de massa e por convecção por unidade de massa e calor total perdido por unidade de massa para as 4 condições estudadas são mostrados nas figuras 6, 7 e 8.

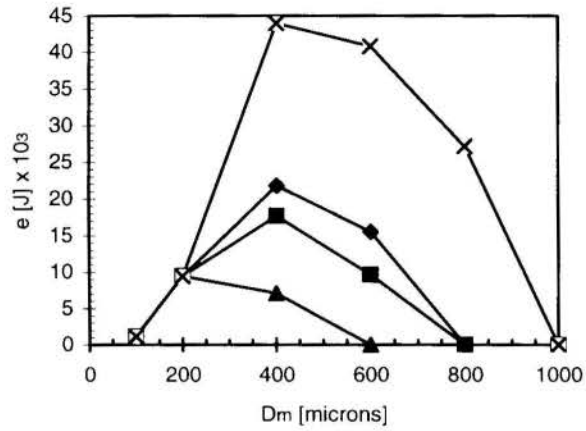


Figura 4: Calor perdido por evaporação (e) em função do diâmetro médio (D_m) da gotícula para a camada de gases de combustão nas seguintes condições: (Δ) h = 1 m e T_∞ = 473 K; (■) h = 2 m e T_∞= 473 K; (◆) h = 1 m e T_∞ = 573 K; (x) h = 2 m e T_∞= 573 K.

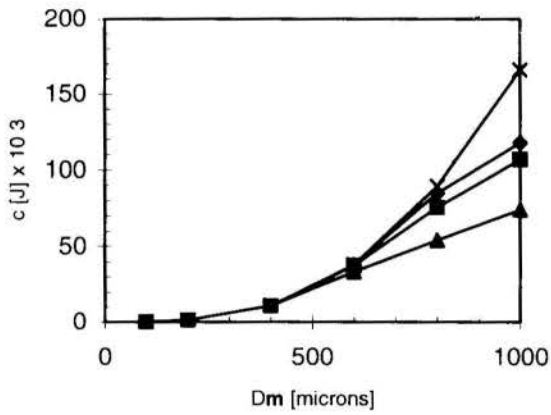


Figura 5: Calor trocado por convecção (c) em função do diâmetro médio (D_m) da gotícula para a camada de gases de combustão nas condições: (Δ) h = 1 m e T_∞ = 473 K; (■) h = 2 m e T_∞ = 473 K; (◆) h = 1 m e T_∞ = 573 K; (x) h = 2 m e T_∞ = 573 K.

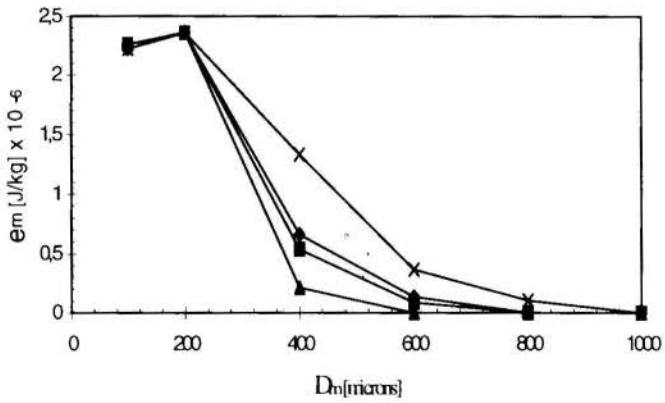


Figura 6: Calor trocado por evaporação por unidade de massa (e_m) em função do diâmetro médio da gotícula para a camada de gases de combustão nas seguintes condições: (Δ) h = 1 m e T_∞ = 473 K; (■) h = 2 m e T_∞ = 473 K; (◆) h = 1 m e T_∞ = 573 K; (x) h = 2 m e T_∞ = 573 K.

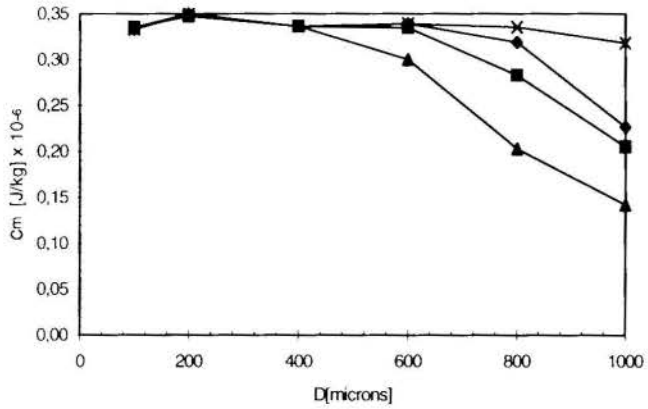


Figura 7: Calor trocado por convecção por unidade de massa (c_m) em função do diâmetro médio (D_m) da gotícula para a camada de gases de combustão nas seguintes condições: (Δ) h = 1 m e T_∞ = 473 K; (■) h = 2 m e T_∞= 473 K; (◆) h = 1 m e T_∞ = 573 K; (x) h = 2 m e T_∞ = 573 K.

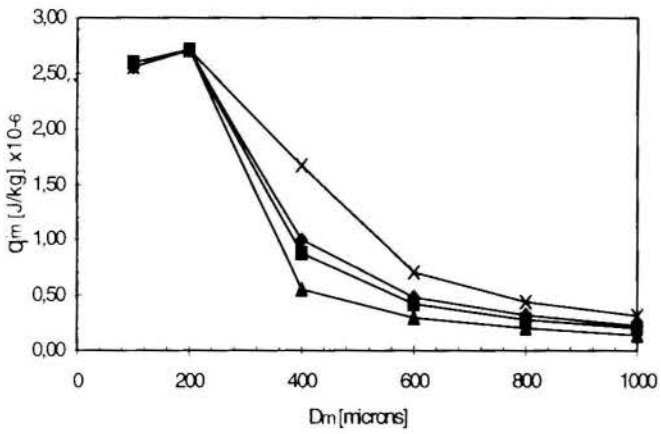


Figura 8: Calor total trocado por unidade de massa (q_m) em função do diâmetro médio da gotícula para a camada de gases de combustão nas seguintes condições: (Δ) h = 1 m e T_∞ = 473 K ; (■) h = 2 m e T_∞ = 473 K; (◆) h = 1 m e T_∞ = 573 K; (x) h = 2 m e T_∞ = 573 K.

Comparando as figuras 6 e 7, vemos que a ordem de grandeza do calor trocado por evaporação por unidade de massa é bem maior que o calor trocado por convecção por unidade de massa, ressaltando a importância do mecanismo de vaporização em gotículas pequenas.

Baseado nas figuras 6, 7 e 8 , podemos verificar que o diâmetro médio de 200 μ é o que retira maior quantidade de calor por unidade de massa das gotículas para as 4 condições estudadas. Portanto o pulverizador a ser instalado nesta sala deve produzir gotículas de diâmetro médio de 200 μ. Como vimos anteriormente, para gotículas menores o calor trocado por vaporização fica limitado pela massa da gotícula.

Cabe ressaltar que esse diâmetro ótimo de 200 μ vale apenas para o cenário de incêndio estudado, com as condições iniciais indicadas anteriormente. Para cada cenário de incêndio típico deverá ser otimizado um diâmetro de gotícula. O pulverizador deve possuir uma distribuição tal que atenda esse diâmetro médio de gotícula.

Tentaremos agora correlacionar o calor total perdido por evaporação e convecção com o diâmetro médio da gotícula. Na figura 9, é mostrado o gráfico $\ln(q_m)$ em função de $\ln(D_m)$ para as 4 condições estudadas.

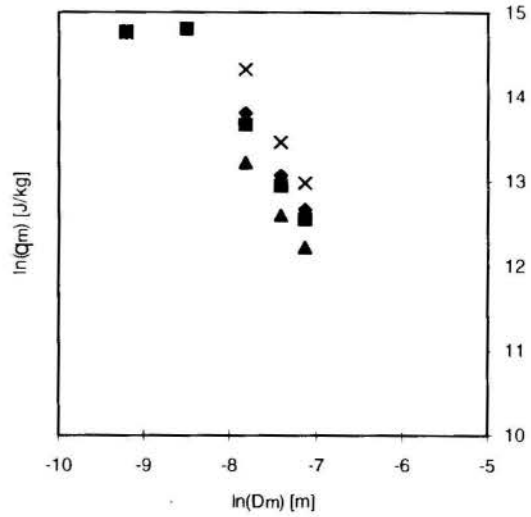


Figura 9: Gráfico $\ln(q_m)$ (J/kg) em função de $\ln(D_m)$ (m) para a camada de gases de combustão nas seguintes condições: (Δ) h = 1 m e T_∞ = 473 K; (■) h = 2 m e T_∞ = 473 K; (◆); h = 1 m e T_∞ = 573 K; (x) h = 2 m e T_∞ = 573 K.

Obtém-se no gráfico um coeficiente angular médio de -0,96 (ângulo -44^0). Isto indica que o calor total absorvido (q_m) é proporcional ao diâmetro inicial da gotícula a potência -0,96. Para gotículas de diâmetro uniforme com velocidade relativa baixa em relação aos gases de combustão, a evaporação é proporcional a potência -0,5 do diâmetro. Quando a velocidade relativa é apreciável, a taxa de vaporização varia com a potência -1,5 do diâmetro (Ranz e Marshall, 1952). Como a distribuição das gotículas não é uniforme no pulverizador, a presente estimativa parece razoável. Uma expressão obtida experimentalmente por Kung (1977), indicou que o calor total absorvido (q_m) é proporcional ao diâmetro inicial da gotícula a potência -0,73.

CONCLUSÕES

Analisando os resultados obtidos com a simulação utilizando o modelo de vaporização de gotículas em um sistema de proteção contra incêndio podemos concluir:

- Os resultados obtidos com o modelo simplificado foram baseados em dados experimentais, incluindo diâmetro médio das gotículas, velocidade das gotículas, temperatura e espessura da camada de gases de combustão. O modelo prediz o calor absorvido pela água sem considerar o aquecimento da camada de gases.
- Os resfriamento dos gases de combustão pela vaporização de gotículas de água parece ser um mecanismo promissor no combate a incêndio. A evaporação de água finamente nebulizada nos sistemas de proteção contra incêndio produz um resfriamento maior dos gases de combustão com forças de arrasto menores nas gotículas. A relação entre a força de arrasto e a força de empuxo nas gotículas é importante para verificar se a gotícula ultrapassa ou não a camada de gases de combustão .
- Foi predito que gotículas de diâmetro médio de 200 μ é o que retira maior quantidade de calor por vaporização para 4 condições da camada de gases de combustão: 1) h =1 m e T_∞ = 473K; 2) 1) h =2 m e T_∞ = 473K; 3) h =1 m e T_∞ = 573K; 4) h=2 m e T_∞ = 573K. É portanto, o diâmetro médio ótimo para a gotícula.
- A influência da temperatura e da espessura da camada de gases de combustão são significativas para a evaporação das gotículas. A influência da velocidade inicial é muito pequena.
- O calor total absorvido pelas gotículas é proporcional ao diâmetro inicial elevado a uma certa potência, enquanto a

vaporização não se completa. O valor encontrado aproximou-se do medido experimentalmente por Kung (1977).

REFERÊNCIAS

Alpert,R.L., 1984, "Calculated Interactions of Sprays with Large Buyant Flows", Journal of Heat Transfer, 106 pp. 310-317.

Boysan, F., Ayres W.H., Swithenbank, J. and Pan, Z., 1982, "Three-Dimensional Model of Spray Combustion in Gas Turbine Combustor", Journal of Energy, 6 pp. 368- 375.

Chow, W.K. and Fong, N.K., 1989(a), "Application of field modelling technique to simulate interaction of sprinkler and fire-induced smoke layer", Combustion Science and Technology, v.89, pp.101-151.

Chow, W.K., 1989 (b), "On the Evaporation of the sprinkler water spray",Fire Technology, pp.364-373.

Hoffmann,N.A.; Galea,E.R., 1993, "An extension of fire-field modelling technique to include fire-sprinkler interaction-I, The mathematical basis", International Journal of Heat Mass Transfer, v.36, pp.-1435-1444.

Kung, H.C., 1977, "Cooling of Room Fires by Sprinkler Spray", Journal of Heat Transfer, v.99, pp.353-359.

Kuo, K.K., 1986 "Principles of Combustion", John Wiley & Sons, pp.374-380, 575-584.

Lambris, S., Combs L.P., 1962, "Steady-State Combustion Measurements in LOX-RP-1 Rocket Chamber and Related Spray Burning Analisys ", Detonation and Two-Phase Flow, Academic Press, New York, pp.141-173.

Mawhinney, J.R., Dlugogorski,B.Z. and Kim,A.K., 1994, "A Closer Look at the Fire Extinguishing Properties of Water Mist", Fire Safety Science - Proceedings of the 4th International Symposium, pp.47-60.

Prahl, J.M., Wendt B. ,1988, "Discharge distribuition performance for an axissymetric model of a fire sprinkler head, Fire Safety Journal, 14, pp.101-111.

Ranz, W.E. and Marshal, W.R., 1952, "Evaporation from Drops", Chemical Engineering Progress, 48, pp.141-173.

Rasbash, D.J., Rogowski, Z.W. and Stark, G.W., 1960, "Mechanisms of Extinction of Liquid Fires with Water Spray", Combustion and Flame, v.4, pp.223-234.

Spalding, D.B., 1953, Fourth International Symposium on Combustion, Williams and Wilkins Co., Baltimore, pp.847-864.

Wise, H. and Agoston, G.A., 1958, "Literature on the Combustion of Petroleum", American Chemical Society.

ABSTRACT

The evaporation of water mist in fire protection systems produces higher cooling and smaller air-drag effect. However, smaller water droplets may not be able to penetrate the smoke layer and reach the burning object. In this article a simplified model is presented to evaluate the evaporation of water droplets in order to optimize the water droplet size and warrant a faster fire extinction.

OBTENÇÃO DA TAXA DE REGRESSÃO VOLUMÉTRICA DE GRÃOS DE PÓLVORA ATRAVÉS DE RESULTADOS DE TESTES CONVENCIONAIS EM BOMBA MANOMÉTRICA

Alcéstes G. de Oliveira Filho * e Paulo L. C. Lage **
*Departamento de Engenharia Química
Instituto Militar de Engenharia, 22290-470 - Rio de Janeiro - RJ
**Programa de Engenharia Química
COPPE / UFRJ, 21945-970 - Rio de Janeiro - RJ

RESUMO

O problema principal da balística interna das armas de tubo supõe que a queima da pólvora ocorra a volume constante e se utiliza de grandezas obtidas experimentalmente em bomba manométrica para o ajuste de uma equação geral de combustão. Todavia, estas grandezas não traduzem o comportamento da queima em todo o processo por estarem baseadas em dados do final da combustão e em fatores de forma iniciais do grão. Este trabalho apresenta um método de obtenção de uma taxa de regressão volumétrica de propelentes, a partir de testes realizados em equipamento convencional, com o fim de se obter dados que possibilitem melhorar a previsão do comportamento de um projetil no interior do tubo de uma arma.

INTRODUÇÃO

A solução do problema principal da balística interna das armas de tubo, desde um revólver a um canhão de grosso calibre, implica na obtenção de uma equação adequada para a combustão da pólvora que irá impulsionar o projetil. Este é um problema complexo para o qual se adota a suposição de uma combustão a volume constante.

De forma a reproduzir-se este fenômeno, realizam-se testes com as pólvoras que irão compor a munição em sistema de vaso de pressão fechado ("Closed Vessel", ou C.V.), denominado de bomba manométrica. Ao fim dos experimentos, obtém-se a chamada "vivacidade", *A*, da pólvora e, juntamente com considerações geométricas, a chamada "velocidade de consumação", ω, grandezas utilizadas no ajuste de uma equação geral de combustão, normalmente representada pela Eq.(1). Uma vez que as medidas experimentais indicam que a taxa de combustão de propelentes é função direta de uma potência da pressão, considera-se a seguinte expressão para a taxa de regressão mássica da pólvora (USAMC, 1965):

$$\frac{dm_p}{dt} = \rho_p S B P^{\beta} \qquad (1)$$

onde S é a área da superfície de queima do grão, P é a pressão do sistema, ρ_p é a massa específica do propelente e as constantes B e β são coeficientes ajustados para a equação da taxa, seguindo-se a forma geral da Equação de Saint Robert (Ball, 1972).

Piobert, em seu célebre "Traité d'Artillerie" de 1839, verificou que a queima de um propelente compactado ocorre somente nas superfícies expostas à combustão e por camadas paralelas. Esta observação, que ficou conhecida como "Lei de Piobert", foi originariamente enunciada para a pólvora negra (Ball, 1972), a qual não é mais utilizada para a propulsão balística. Porém, Paul Vieille, a quem é atribuída a invenção da pólvora coloidal em 1884 (Médard, 1992), verificou experimentalmente que a queima por camadas paralelas era, também, a propriedade fundamental das pólvoras coloidais (Besse, 1961). Assim, a variação da área superficial, S, com o progresso da combustão é determinada considerando-se que a geometria não muda apreciavelmente durante o processo. A taxa linear de queima é suposta uniforme nesta superfície, onde também se admite que a ignição tenha se processado instantânea e uniformemente, muito embora não seja o que ocorra na prática (USAMC, 1965). Em adendo, verifica-se que não se pode tratar a mistura de gases resultantes como um gás perfeito, devido às grandes pressões e temperaturas atingidas (Corner, 1950). Porém, para as altas temperaturas atingidas na combustão de pólvoras (superiores a 2500 K), onde os efeitos da atração intermolecular são desprezíveis, pode-se igualar a zero uma das constantes da equação de Van der Waals, sendo comum a adoção da equação de estado na forma (Powell et al., 1979):

$$PM\left(\overline{V}_g - \overline{\eta}\right) = RT \qquad (2)$$

onde $\overline{V}_g$ é o volume específico do gás, $\overline{\eta}$ é o seu co-volume específico, *M* é a sua massa molecular média, T é a temperatura e R é a constante universal dos gases.

O co-volume específico, utilizado na Eq. (2), é considerado constante, sendo obtido a partir do ajuste de, no mínimo, três resultados de experimentos à lei de Nobel e Abel (Besse, 1961):

$$P_{max} = f\Delta / \left(1 - \overline{\eta}\Delta\right) \qquad (3)$$

onde P_{max} é a pressão máxima atingida ao final do experimento, f é a "força" do propelente e Δ é a "densidade" de carregamento na bomba manométrica.

Portanto, o esforço em introduzir as peculiaridades da pólvora através da experiência possui limitações, pois se utiliza de suposições válidas, a rigor, somente para a fase inicial e final da queima.

Neste trabalho, busca-se calcular uma taxa volumétrica de combustão de pólvoras, através de um método simples que manipule os resultados de testes realizados em equipamento de uso corrente, sem necessidade de adaptações, e obter uma forma para representar mais precisamente todo o processo, contribuindo para uma melhor previsão das variáveis de interesse.

CINÉTICA DE COMBUSTÃO DE PÓLVORAS

Equacionamento Tradicional. Admitindo-se que a fração linear de pólvora queimada dentro da bomba, no instante t e à pressão P, é dada por z, descreve-se a equação de combustão por:

$$G(z, P, t) = 0. \qquad (4)$$

Considerando-se condições ideais de ignição, de integridade dimensional do grão até o seu completo desaparecimento e velocidade linear de combustão, μ, constante sobre a superfície de queima, tem-se:

$$dz = S/V_{P0}\,\mu.dt \tag{5}$$

onde V_{P0} é o volume inicial do grão de pólvora.

Desta forma, a razão entre a área superficial de reação, S, no instante t, e a área inicial, S_0, pode ser sempre calculada a partir de considerações puramente geométricas, sendo, portanto, denominada de função de forma geométrica:

$$\phi(z) = S/S_0 \tag{6}$$

A velocidade linear de combustão, μ, é suposta como sendo função apenas da pressão (Besse, 1961) e expressa, na sua forma mais simples, por:

$$\mu = \omega\,\theta(P) \tag{7}$$

onde ω é uma característica natural da pólvora, denominada de velocidade de consumação, tendo as dimensões no SI expressas em m/(s.Pa). A velocidade de consumação é definida de modo a se obter um parâmetro de consumo do propelente que seja praticamente independente da pressão do gás. Usualmente, $\theta(P)$ assume a forma funcional P + *B*, onde *B* é uma constante empírica.

Substituindo-se as Eqs. (6) e (7) na Eq. (5), obtém-se:

$$dz/dt = A\,\phi(z)\,\theta(P) \tag{8}$$

onde *A* é a chamada vivacidade da pólvora, que corresponde ao inverso do valor da integral da curva pressão por tempo obtida no "tiro" na bomba manométrica.

Quando se têm lâminas suficientemente longas de espessura δ, a expressão da vivacidade é dada por:

$$A = 2\omega/\delta \tag{9}$$

Considerando-se que a primeira noção de vivacidade de uma pólvora prende-se ao tempo total de combustão, a Eq. (9) demonstra que, neste caso, quanto menor a sua espessura, mais "viva" (ou rápida) é a pólvora. Ao contrário, quanto mais espessa, mais lenta.

É óbvio que a função de forma geométrica, após a completa ignição, irá representar a regressão geométrica do grão apenas enquanto o mesmo mantiver a sua forma, devendo se modificar no momento em que fissurar ou sofrer fragmentação. Portanto, para maior rigor do equacionamento, é adotada uma função de forma experimental na Eq. (8).

Equacionamento via Cinética Química. Williams (1985) descreve a forma da taxa cinética de consumo de um propelente durante a sua combustão unidimensional. Embora diversos processos possam controlar a cinética de reação (a gaseificação, a reação em fase gasosa, a reação em fase condensada, etc.), pode-se, aproximadamente, representar a cinética de combustão por uma equação na forma:

$$-\frac{1}{S}\frac{dm_p}{dt} = D\,T_i^{\alpha}\exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \tag{10}$$

onde T_i é a temperatura da superfície de queima, E_a é a energia de ativação do processo de combustão e D e α são parâmetros da taxa cinética de combustão. Deve-se ressaltar que o fator pré-exponencial, D, deve ser linearmente dependente da massa específica do gás e, portanto, da pressão. Isto está de acordo com a forma de $\theta(P)$, vista anteriormente no equacionamento tradicional.

De acordo com o modelo termofluidodinâmico a ser apresentado, pode-se colocar esta taxa de reação em termos volumétricos pela definição da fração volumétrica ocupada pela pólvora, c, que, dividida pelo seu valor inicial, c_0, fornece, por definição, a fração volumétrica da pólvora não queimada:

$$c/c_0 = V_P/V_{P0} \tag{11}$$

onde V_P é o volume do grão de pólvora em uma dado instante de tempo. Logo, sendo ρ_P constante, tem-se, para a variação da massa da pólvora m_P:

$$-\frac{1}{S}\frac{dm_p}{dt} = -\frac{S_0}{S}\frac{1}{a_{S0}}\frac{d}{dt}\left(\frac{c}{c_0}\right) \tag{12}$$

onde a_{S0} é a área superficial específica da pólvora nas condições iniciais ($a_{S0} = S_0/(V_{P0}\,\rho_P)$). Portanto, segundo a definição da função de forma geométrica, Eq. (6), pode-se escrever:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{c}{c_0}\right) = -D\,a_{S0}\,T_i^{\alpha}\exp\left(\frac{-E_a}{RT_i}\right)\phi\left(\frac{c}{c_0}\right) \tag{13}$$

A função de forma geométrica é aqui considerada como uma função da fração de pólvora ainda não queimada, c/c_0, que por sua vez, está diretamente relacionada com a fração linear de pólvora queimada, z, da formulação clássica. A função de forma geométrica deve, no início da combustão, corresponder exatamente à função obtida a partir da hipótese de regressão linear da superfície de queima. Entretanto, em algum ponto durante o processo, o grão de pólvora sofre fratura, ou mesmo fragmentação, mudando as suas características geométricas.

Uma aproximação empírica para a função de forma geométrica é dada por:

$$\phi(c/c_0) = (c/c_0)^n \tag{14}$$

a qual satisfaz os limites de ϕ = 0 e 1 para c = 0 e c_0, respectivamente. Pode-se provar facilmente que, no caso de uma placa plana infinita, n = 0, enquanto que, no caso de um cubo ou de uma esfera, n = 2/3, sendo estes os limites mínimo e máximo, respectivamente, para o valor do expoente, n.

Após a fratura ou fragmentação do grão de pólvora, é razoável supor que a função de forma geométrica pode ser aproximada pela Eq. (14), sendo que o expoente, n, será tanto mais próximo de 2/3 quanto maior for o grau da fragmentação sofrida pelo grão.

O objetivo deste trabalho é a determinação, baseada em dados experimentais, dos parâmetros da equação da taxa de combustão, Eq. (13), utilizando funções de forma geométrica adequadas a cada etapa do processo de combustão.

MODELO PARA A COMBUSTÃO DE PÓLVORAS

Modelo termofluidodinâmico para a combustão de pólvoras. O fenômeno da combustão de pólvoras não é diferente de outros processos de combustão, sendo regido pelas equações de conservação de massa, energia, quantidade de movimento e espécies químicas (Williams, 1985, Kuo, 1986) e por uma cinética específica para esta reação. Portanto, para que possa ser

possível determinar a cinética de combustão, é necessário desenvolver um modelo termofluidodinâmico para o processo de queima dentro da câmara de combustão. Algumas hipóteses foram assumidas na análise, a saber: (i) a mistura da pólvora e do gás de combustão foi considerada um "pseudo-gás", onde a pólvora passa a ser um de seus constituintes, (ii) foram desprezadas quaisquer variações das grandezas envolvidas na análise na seção reta da câmara de combustão e (iii) as forças de campo e os efeitos da viscosidade do gás foram desprezados.

A massa específica do "pseudo-gás", ρ, se relaciona com as massa específicas do gás, ρ_g, e da pólvora, ρ_p, pela equação:

$$\rho = \frac{m_p + m_g}{V} = \frac{\rho_p V_p + \rho_g V_g}{V} = \rho_p c + \rho_g (1 - c) \qquad (15)$$

onde m_p é a massa da pólvora no carregamento, m_g é a massa do gás na câmara de combustão, V_g é o volume ocupado pelo gás e $c = V_P / V$, é a fração volumétrica de pólvora no "pseudo-gás", sendo V_P e $V = V_P + V_g$ os volumes ocupados pela pólvora e pelo "pseudo-gás", respectivamente.

Equacionamento para o Cálculo da Taxa de Combustão. Para as condições de ensaio em C. V., considera-se o meio como homogêneo. Além disso, a massa específica do sistema fechado, ρ, é constante e o processo pode ser considerado adiabático. Assim, as equações de conservação podem ser escritas como:

$$\partial\rho/\partial t = 0 \qquad \text{ou} \qquad \rho = \text{constante} \qquad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho . v)}{\partial t} = 0 \qquad \text{ou} \qquad v = 0 \qquad (17)$$

$$\rho_p \frac{\partial c}{\partial t} = R_p \qquad \text{pois} \qquad \rho Y_p = \rho_p c \qquad (18)$$

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \left(\frac{\partial \ln \overline{V}}{\partial \ln T}\right)_{P,c} \frac{dP}{dt} + (-\Delta h)\left(-R_p\right) \qquad (19)$$

onde v é a velocidade axial do "pseudo-gás" dentro da câmara, $(-R_p)$ é a taxa cinética da combustão da pólvora, C_p é o calor específico a pressão constante do "pseudo-gás", $(-\Delta h)$ é o calor de combustão da pólvora, Y_p é a fração mássica da pólvora no "pseudo-gás" e t é o tempo.

Combinando-se a Eq. (15) com a Eq. (2), obtém-se uma equação de estado para o "pseudo-gás":

$$\rho = \frac{1}{\overline{V}} = \rho_p c + \left[\frac{RT}{PM} + \overline{\eta}\right]^{-1} (1 - c) \qquad (20)$$

A partir da Eq. (20), observando-se que ρ_p e $\overline{\eta}$ são considerados constantes, obtém-se, facilmente:

$$\left(\frac{\partial \ln \overline{V}}{\partial \ln T}\right)_{P,c} = \left(1 - \frac{\rho_p}{\rho} c\right)\left(1 - \overline{\eta}\rho_g\right) \qquad (21)$$

O calor específico do "pseudo-gás" pode ser calculado pela seguinte regra de mistura:

$$\rho C_p = \rho \sum_i Y_i C_{pi} = \rho_g c\, C_{pg} + \rho_p (1 - c) C_{pp} \qquad (22)$$

onde Y_i é a fração mássica de cada componente do "pseudo-gás".

Derivando-se a Eq. (2), de forma conveniente, em relação ao tempo e explicitando-se a derivada da temperatura, obtém-se:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{M}{R}\left(\frac{1}{\rho_g} - \overline{\eta}\right)\frac{dP}{dt} + \frac{PM}{R}\frac{d\left(\rho_g^{-1}\right)}{dt} \qquad (23)$$

Finalmente, combinando-se as Eqs. (18), (19), (20), (21) e (23), obtém-se uma expressão para a taxa de regressão volumétrica da pólvora em função de c(t) e dos seguintes dados experimentais: Δh (determinado em calorímetro adiabático) e t, P e dP/dt (determinados no ensaio em C.V.). A integração desta expressão pela quadratura trapezoidal fornece uma equação na forma da Eq. (24) abaixo, cuja raiz $c(t_j)$ pode ser obtida para cada instante de tempo medido durante o teste em C. V.:

$$c(t_j) = \frac{F\left[c\,(t_{j-1})\right] + F\left[c\,(t_j)\right]}{2}\Delta t_j + c\,(t_{j-1}) \qquad (24)$$

A determinação do valor de $c(t_j)$ é feita através de um programa de computador, utilizando-se Newton-Raphson e partindo-se dos dados correspondentes ao ponto experimental mais preciso, ou seja, o ponto final do experimento em bomba manométrica, onde c = 0.

DETERMINAÇÃO DA CINÉTICA DE PÓLVORAS

Redução dos dados experimentais. Foram analisados dois casos experimentais de pólvoras de Base Dupla (BD), de mesma constituição química, fabricadas em Piquete, SP, pela IMBEL S.A., cujas características estão listadas na Tabela 1. Os dados experimentais utilizados são os resultados obtidos dos ensaios em calorímetro (calor de reação) e dos testes em C.V. realizados da forma tradicional (Santiago, 1994).

Os resultados experimentais do calor de reação foram confirmados pelo cálculo com o programa CETPC (McBride et al., 1994), quando se obtiveram valores teóricos diferindo de 1%, em média, possibilitando estimar-se a massa molecular média dos produtos de combustão, tendo-se optado pela utilização do valor calculado. Também, através deste programa, fez-se o cálculo das temperaturas finais do gás correspondentes aos três testes de cada pólvora, ajustando-se a avaliação de M para cada caso. Obtiveram-se, então, os dados de entrada para o programa de determinação de c(t) e dc/dt, apresentados na Tabela 2. Os resultados reduzidos dos experimentos em bomba manométrica estão ilustrados na Figura 1, para a pólvora A2, representando todo o processo de queima da pólvora. Os resultados obtidos para a pólvora A5 são similares. Nesta figura também estão representadas as curvas calculadas utilizando a taxa de combustão obtida.

Deve-se ressaltar que, ainda assim, algumas simplificações foram mantidas. Dados dos produtos de combustão da pólvora foram obtidos a partir da redução de resultados experimentais com o programa CETPC (McBride et al., 1994), que trata os gases como ideais. Além disso, o calor específico do sistema foi considerado, nesta primeira análise, constante e igual ao do gás, isto é, a Eq. (22) foi aplicada com $C_{pp} = C_{pg}$. Nos cálculos

Tabela 1 - Características geométricas das pólvoras.

Identificação	A2	A5
Forma Inicial	lâmina	lâmina
Dimensões Médias (mm)	8,42 × 8,05 × 0,79	2,78 × 2,52 × 0,24
a (Eq. 26)	0,31	0,30
b (Eq. 26)	0,69	0,70

Tabela 2 - Dados de entrada para o cálculo de c e dc/dt.

Pólvora	A2			A5		
η ($10^{-3}m^3/kg$)	1,0371			1,0014		
Δh (10^6 J/kg)	5,464			5,464		
Δ ($10^3 kg/m^3$)	0,14	0,16	0,18	0,14	0,16	0,18
M (kg/kgmol)	27,2	27,2	27,3	27,2	27,2	27,3
c_0	0,0875	0,10	0,113	0,0875	0,10	0,113
T_{final} (K)	3646	3685	3648	3704	3722	3700

efetuados, foi utilizado o co-volume, obtido conforme descrito anteriormente, e, para isso, a composição dos gases foi considerada constante e em equilíbrio, o que só parece razoável se a pólvora contiver oxidantes energéticos que permitam atingir este estado em intervalo de tempo tão curto quanto o de um "tiro" em bomba manométrica. Portanto, o caso experimental analisado é exatamente o de uma pólvora BD, cujo oxidante é a nitroglicerina.

Correlação da taxa de combustão das pólvoras. A taxa de combustão utilizada é a expressa pela Eq. (13), com $\alpha = 0$, uma vez que não há dados experimentais suficientes para a regressão de um número muito elevado de parâmetros. Definindo-se a constante A de forma que $A\,\rho_g = D\,a_{S0}$, de modo a explicitar a dependência da taxa com a massa específica do gás, a equação da taxa de combustão fica na forma:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{c}{c_0}\right) = -A\,\rho_g \exp\left(\frac{-E_a}{RT_i}\right)\phi\left(\frac{c}{c_0}\right) \qquad (25)$$

onde A é diretamente proporcional a a_{S0}.

Como as pólvoras A2 e A5 têm a mesma constituição química, sendo do mesmo lote de fabricação, a energia de ativação, E_a, deve ser a mesma para ambas as pólvoras. Além disso, para a parte inicial da combustão, a função de forma geométrica, ϕ, deve ser dada pela regressão linear da superfície de queima, de acordo com a forma geométrica do grão. A esta parte inicial do processo de combustão denomina-se de região de regressão geométrica. Para grãos laminares, pode-se correlacionar

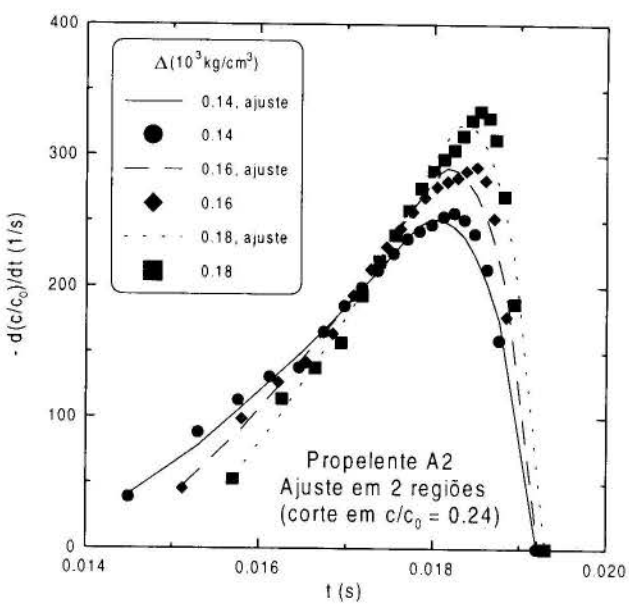


Figura 1 - Taxa de combustão ao longo do tempo (pólvora A2).

S/S_0, que é a função de forma, com $V_P/V_{P0} = c/c_0$ pela forma linear:

$$\phi = \frac{S}{S_0} = a\left(\frac{c}{c_0}\right) + b \qquad (26)$$

onde a e b são duas constantes ajustadas aos valores calculados geometricamente, de tal forma que $a + b = 1$. Os valores de a e b ajustados para as pólvoras A2 e A5 estão listados na Tabela 1. Após a região de regressão geométrica da combustão, a pólvora se fragmenta, modificando a sua função de forma geométrica, quando, então, adota-se a fórmula empírica dada pela Eq. (14).

Para a região de regressão geométrica da combustão, os fatores pré-exponenciais, A, para as duas pólvoras, devem diferir apenas de um fator relacionado à razão das áreas específicas das pólvoras, isto é:

$$\frac{A_{A5}}{A_{A2}} = \frac{a_{S0}(A5)}{a_{S0}(A2)} = 3{,}26 \qquad (27)$$

onde foram utilizadas as dimensões médias das pólvoras listadas na Tabela 1.

A correlação dos dados experimentais foi feita pelo método dos mínimos quadrados, utilizando-se, para cada uma das pólvoras, os dados obtidos para as três densidades de carregamento. Nenhuma consideração quanto aos erros envolvidos no processo de ajuste foi feita, uma vez que é muito difícil inferir o erro dos dados utilizados, devido à complexidade da redução dos dados experimentais.

A combustão da pólvora mais "viva" (A5) é extremamente rápida, o que deve, sem dúvida, ocasionar uma maior incerteza nos dados obtidos dos resultados experimentais. Além disso, por ter uma espessura menor, ela está mais sujeita à fragmentação que a pólvora A2, ocasionando uma menor região de regressão geométrica. Desta forma, utilizaram-se os dados da pólvora A2 para correlacionar E_a, além de A_{A2}.

A correlação de E_a e de A para a pólvora A2 foi realizada na região de regressão geométrica usando as Eqs. (25) e (26), com os dados de taxa de reação para os quais $y < c/c_0 < 1$, onde o valor de y foi escolhido de forma a fornecer o menor desvio médio entre os dados experimentais e os calculados pela equação da taxa de combustão, obtendo-se o valor de 0,3 para y. Para os dados na região de $0 < c/c_0 < y$, ajustou-se a equação da taxa segundo as Eqs. (14) e (25), determinando-se valores para n e A. Deve-se notar que o valor de A nesta região do processo de queima deve ser diferente do valor para a região de regressão geométrica devido à mudança da função de forma geométrica e à necessidade de continuidade dos valores da taxa de combustão entre as regiões de ajuste. Para manter a continuidade também foi necessário fazer pequenas alterações no valor anterior de c/c_0 que define a transição entre as regiões do processo de combustão. O erro médio da correlação para a taxa de combustão foi de 3,1% na região de regressão geométrica e de 5,8% na região final do processo de queima. A correlação obtida está expressa na Tabela 3 e a comparação dos valores calculados pela correlação com os valores experimentais está representada nas Figuras 2 e 3.

O ajuste dos parâmetros cinéticos da pólvora A5 é dificultado por um maior erro no processo de redução dos dados experimentais e pelo fato de que o processo de combustão caracteriza-se por ter três regiões, e não duas, a saber: a região de regressão geométrica, a região de combustão da pólvora fraturada e/ou fragmentada e a região de extinção. No caso da pólvora A2, as duas últimas regiões ocorrem ao mesmo tempo, sendo indistiguíveis. Para a pólvora A5, de menor espessura, a fratura ou fragmentação dos grãos ocorre bem mais cedo. Isto reduz a extensão da região de regressão geométrica, de forma que é muito

Tabela 3 - Parâmetros cinéticos das pólvoras.

Pólvora	E_a (J/kgmol)	Parâmetros cinéticos		
		Região de regressão geométrica	Região de fratura e fragmentação	Região de extinção
A2	$8{,}18 \times 10^6$	$0{,}24 < c/c_0 < 1$	$0 < c/c_0 < 0{,}24$	
		$A^a = 4{,}18$	$A^a = 5{,}15$	$n = 0.334$
A5	$8{,}18 \times 10^6$	$0{,}5 < c/c_0 < 1$	$0{,}17 < c/c_0 < 0.5$	$0 < c/c_0 < 0.17$
		$A^a = 15{,}2$	$A^a = 16{,}0$	$A^a = 25{,}1$
			$n = 0.315$	$n = 0{,}568$

[a] a unidade de A é em $m^3/(kg \cdot s)$ ou $(J/kg)/(Pascal \cdot s)$.

imprecisa a determinação do valor de E_a a partir desta região. Porém, de acordo com o modelo cinético, o valor de E_a é igual ao obtido para a pólvora A2, sendo utilizado o valor já obtido. Assim, correlacionaram-se apenas os dados das duas outras regiões de queima, utilizando a equação da taxa (Eqs. 25 e 26), ajustando os valores de A e n, em cada região. Os limites de cada região de queima foram determinados tal como foi descrito para a pólvora A2. O erros médios da correlação para a taxa de combustão nas duas regiões finais do processo de queima foram de 1,1%, na região de fratura e fragmentação, e de 9,8%, na região de extinção. A correlação obtida está também descrita na Tabela 3. Os valores para a taxa de combustão obtidos da correlação comparam, tal como para a pólvora A2, favoravelmente com os valores experimentais.

Vale ressaltar que, para ambas as pólvoras analisadas, quando os dados de cada um dos "tiros" na bomba manométrica eram utilizados isoladamente para ajustar os parâmetros cinéticos, os valores obtidos eram sempre próximos e plenamente compatíveis.

Além da igualdade dos valores de E_a para as duas pólvoras, uma outra confirmação da abordagem teórica é obtida pela comparação dos valores ajustados para o coeficiente A na região de regressão geométrica para as duas pólvoras. A razão A_{A5}/A_{A2} é de 3,64, sendo bem próxima ao valor teórico de 3,26 (Eq. 27).

Deve-se notar que o fator pré-exponencial A tem significado semelhante ao da vivacidade da pólvora, tendo unidade de energia específica pelo produto Pascal-segundo ((J/kg)/(Pa s)).

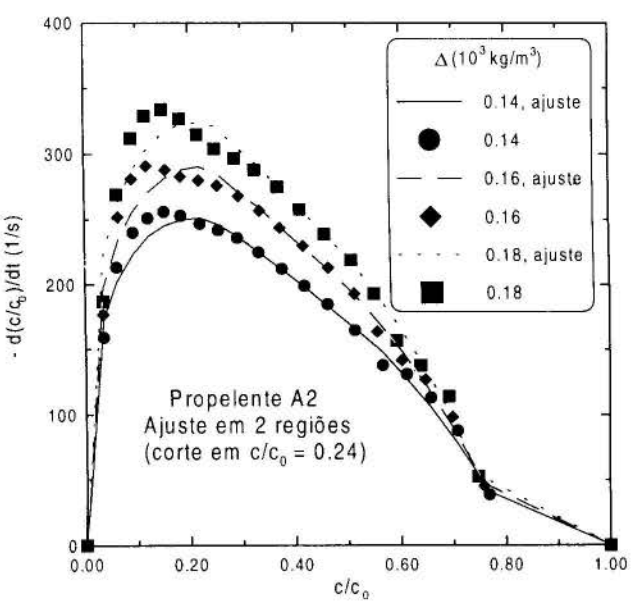


Figura 2 - Taxa de combustão contra c/c_0 (pólvora A2)

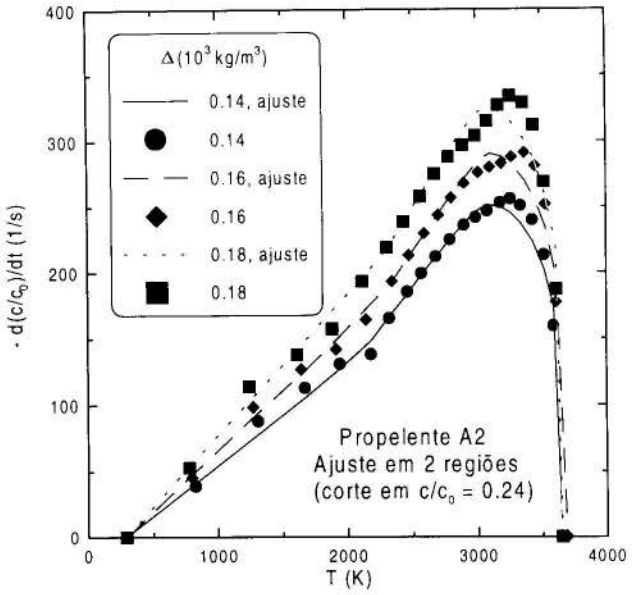


Figura 3 - Taxa de combustão contra temperatura (pólvora A2)

Desta forma, o parâmetro cinético A pode ser considerado uma definição alternativa para a vivacidade de uma pólvora.

SIMULAÇÃO DOS ENSAIOS EM BOMBA MANOMÉTRICA

De posse da equação para a taxa de combustão da pólvora (Eqs. 14, 25 e 26), pode-se utilizá-la, junto com as Eqs. (18), (19), (20), (21) e (22) para simular o comportamento do sistema (c/c_0 e T) durante o "tiro". Este sistema de equações diferenciais foi resolvido numericamente utilizando o integrador DASSL (Brenan et al., 1989).

Como a energia gerada durante a ignição da BD por uma carga de pólvora negra não foi considerada na redução dos dados, a energia gerada apenas pela queima completa do propelente não é suficiente para explicar a aumento de temperatura verificado. Além disso, a hipótese de calor específico constante igual ao do gás ao final do processo de combustão não deve ser muito correta. Tanto o valor do calor específico do gás no início do "tiro" quanto o calor específico do propelente devem ser inferiores ao do gás no final do processo de queima. Ainda, a equação de estado utilizada para o gás começa a apresentar erros consideráveis para temperaturas inferiores a 2500K, que existem no início do processo de queima. Portanto, as simulações foram realizadas a partir do ponto final da combustão, integrando-se do tempo final para o tempo inicial.

As Figuras 4 e 5 mostram o comportamento ao longo do tempo de c/c_0 e de T, respectivamente, dos dados experimentais e dos resultados simulados, para os tiros com densidade de carregamento de 140 kg/m^3 para as duas pólvoras. É clara a concordância obtida para o valor de c/c_0. Os valores simulados para a temperatura se afastam dos dados experimentais quando $T < 2200$ K, tendo, porém, o mesmo comportamento qualitativo.

CONCLUSÕES

Uma nova metodologia foi introduzida para a interpretação dos resultados experimentais dos ensaios de combustão em C. V., que permite calcular todas as variáveis envolvidas durante todo o processo de combustão, a partir da utilização de um modelo termofluidodinâmico para a combustão de pólvoras.

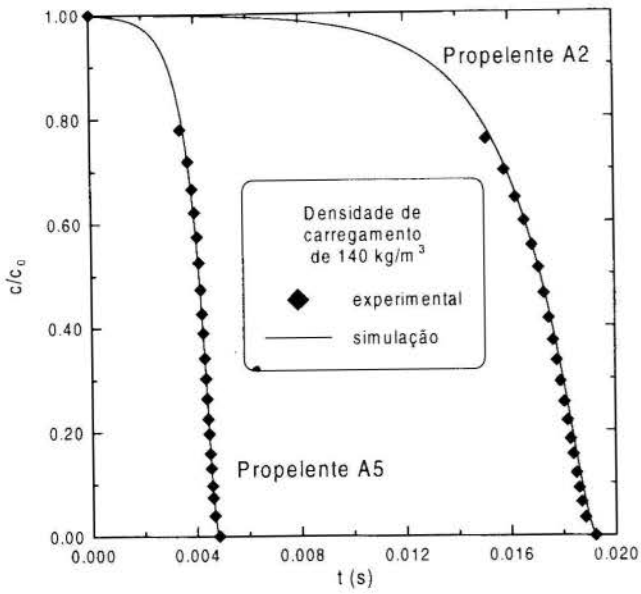


Figura 4 - Valores simulados de c/c_0 ao longo do tempo.

Uma equação teórica para a cinética de combustão de pólvoras foi obtida, em termos volumétricos, a partir da teoria fundamental de combustão de propelentes sólidos e funções de forma geométrica semi-empíricas. Os parâmetros cinéticos desta equação da taxa foram ajustados utilizando os dados experimentais obtidos pelo modelo termofluidodinâmico.

Foi possível identificar diferentes regiões de queima: de regressão geométrica, de fratura/fragmentação e de extinção. Os parâmetros cinéticos determinados são compatíveis para pólvoras de mesma composição química, pois têm a mesma energia de ativação. Um parâmetro cinético foi identificado como sendo uma definição alternativa para a vivacidade de uma pólvora.

A taxa de combustão obtida permitiu simular, através do modelo termofluidodinâmico, todo o processo de combustão durante o "tiro" em bomba manométrica, à exceção do comportamento inicial da temperatura. Esta discrepância se deve ao não fechamento do balanço global de energia e da variação de propriedades físicas durante o processo, que, por ora, não foram considerados.

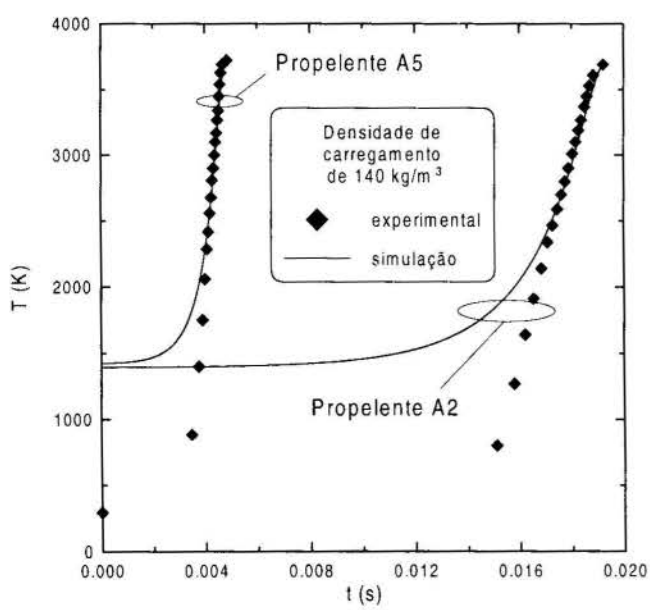


Figura 5 - Valores simulados de temperatura ao longo do tempo.

Dos resultados obtidos, verifica-se que é possível, usando o modelo desenvolvido, a simulação de todo o processo de combustão da pólvora, o que irá possibilitar seu emprego na obtenção de estimativas mais precisas para a velocidade de um projetil no interior do tubo de uma arma.

Agradecimentos. Os autores gostariam de agradecer à IMBEL e ao IPD pelo acesso aos dados experimentais. Um dos autores (P. L. C. Lage) gostaria de agradecer o apoio financeiro obtido junto ao CNPq, processo nº 523777/94-9.

REFERÊNCIAS

Ball, A. M., 1972, "Solid Propellants - Part One", *U. S. Army Material Command Engineering Design Handbook - Explosive Series*, U. S. Army Research Office, Durham, NC.

Besse, L., 1961, "Cours de Balistique Intérieure", École Nationale Supérieure de l'Armament, Brest.

Brenan, K. E., Campbell, S. L. e Petzold, L. R., 1989, "Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations", North-Holland, New York, NY.

Corner, J., 1950, "Theory of the Interior Ballistics of Guns", John Wiley & Sons, New York, NY.

Kuo, K. K., 1986, "Principles of Combustion", John Wiley & Sons, New York, NY.

Mc Bride, B. J. et al., 1994, "CET93 and CETPC: An Interim Updated Version of the NASA Lewis Computer Program for Calculating Complex Chemical Equilibria with Applications", *NASA TM - 4457*, NASA Office of Management, Washington, DC.

Médard, L., 1992, "Paul Vieille et son Oeuvre", Révue Scientifique et Technique de la Défense, 2.e Trimestre, pp. 131-138.

Powell, E. G. et al., 1979, "Equations of State and Thermodynamic Data for Interior Ballistic Calculations", *Interior Ballistics of Guns*, Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 66, pp 325-348.

Santiago, D. G., 1994, "Relatório Técnico n.º 04 / 94 - LQ", Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento (IPD), Rio de Janeiro, RJ, (não publicado).

United States Army Materiel Command (USAMC), 1965, "Interior Ballistics of Guns - AMCP 706-150", *U. S. Army Materiel Command Engineering Design Handbook - Ballistics Series*, USAMC, Washington, DC.

Williams, F. A., 1985, "Combustion Theory", 2nd Edition, Addison-Wesley, New York, NY.

ABSTRACT

The main problem of the internal ballistics of guns assumes that the powder burning occurs entirely in a constant volume chamber. Thus, Closed Vessel experimental data are used to fit a general combustion equation. Since they are based on combustion final conditions and initial shapes of grains, these data are not able to describe all the burning process. This paper introduces a method to calculate the powder volumetric regression rate from Closed Vessel data. The final aim is to develop a model which is able to predict with good accuracy the projectile final velocity inside a gun tube.

ABCM

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE ZONAS PARA PREVISÃO DE CONDIÇÕES OPERACIONAIS DE INCINERADOR

Francisco D.A. de Sousa (*)
Laiete Soto Messias (*)
William Thoru Kobayashi (+)
(*) Instituto de Pesquisas Tecnológicas de São Paulo-IPT
(+) White Martins Gases Industriais S.A.

SUMÁRIO

Este trabalho teve como objetivo verificar a possibilidade de calcular as trocas de calor num incinerador de resíduo líquido, constituído principalmente de água, utilizando o modelo de reator perfeitamente misturado. Os resultados obtidos mostram que apesar da simplicidade do modelo, ele é capaz de prever, com muito boa aproximação, a potência fornecida às paredes e a relação entre a vazão de líquido a incinerar e a vazão de combustível auxiliar.

INTRODUÇÃO

Os incineradores para resíduos líquidos são normalmente constituídos por um queimador, através do qual se injetam o combustível auxiliar, o comburente e o próprio resíduo nebulizado, de forma que a névoa deste se mistura ao escoamento que produz a chama com o combustível auxiliar, fazendo com que as gotas do resíduo atravessem a região de mais alta temperatura da câmara de combustão, entrando em contato com o comburente disponível para sua oxidação.

O processo de incineração pode ser realizado empregando ar ou oxigênio puro como comburentes. No presente trabalho foi considerada a utilização de oxigênio.

As informações mais importantes para projetistas destes equipamentos são as seguintes: i) a máxima taxa volumétrica de combustão (potência liberada por unidade de volume da câmara de combustão) com a qual ainda são atendidos os padrões de emissão de produtos intermediários da combustão (hidrocarbonetos, CO e material particulado); ii) a fração da potência liberada que é trocada com as paredes da câmara e iii) a relação entre a vazão de resíduo e a vazão de combustível auxiliar. Normalmente estão fixados por normas a temperatura e o teor de oxigênio dos gases de combustão à saída da câmara.

No sentido de subsidiar empresas projetistas e usuários destes equipamentos, foi realizado um trabalho com duas vertentes: uma experimental, utilizando uma fornalha de testes completamente instrumentada para medições de variáveis de fronteira e outra de simulação numérica, produzindo um procedimento de cálculo capaz de predizer valores dos dois últimos parâmetros citados, para qualquer condição de operação. A primeira variável, objeto da investigação experimental, não será tratada neste trabalho.

REAÇÃO DE COMBUSTÃO

Como os resíduos líquidos a incinerar são normalmente soluções ou suspensões aqüosas, contendo teores muito baixos de materiais orgânicos (caso contrário, processos de separação poderiam ser aplicados previamente à incineração para remover a maior parte destes contaminantes), decidiu-se desprezar a contribuição destes, quer para a determinação da composição final da mistura gasosa, quer para o balanço de energia. No entanto, se a composição do resíduo for conhecida, é imediato levá-la em conta na reação de combustão e conseqüentemente nos balanços de massa e energia. Desta forma o resíduo foi considerado como água para os propósitos deste trabalho, podendo-se representar a reação de combustão referida à unidade de massa de combustível auxiliar, da seguinte forma:

$$\frac{c}{12}C + hH + \frac{s}{32}S + \frac{n}{14}N + \frac{o}{16}O + zO_2 + \frac{x}{18}H_2O \rightarrow$$

$$\frac{c}{12}CO_2 + \frac{s}{32}SO_2 + \frac{n}{28}N_2 + \left(\frac{h}{2} + \frac{x}{18}\right)H_2O + yO_2 \qquad (1)$$

onde c=0,858; h=0,093; n=0,014; o=0,022 são as frações mássicas dos elementos Carbono, Hidrogênio, Nitrogênio e Oxigênio no combustível auxiliar (neste caso, óleo combustível nº 3A, nomenclatura DNC). x é a relação entre as vazões mássicas de água (simulando resíduo) e de óleo e y é o número de kgmoles de O_2, dependente do teor deste gás fixado nos gases efluentes. Se for fixado o teor de 5% (base seca) para O_2, tem-se y=0,00381 kgmoles e z=0,09831 kgmoles, tudo referido a 1 kg de óleo combustível.

BALANÇO DE ENERGIA

No caso presente, tomando como referência um kg de óleo, tem-se, para o volume de controle constituído pela câmara de combustão, em regime permanente:

$$\sum m_e h_e - \sum m_s h_s = -q_{vc} \qquad (2)$$

entalpia associada aos fluxos que entram na câmara de combustão	-	entalpia associada ao fluxo que sai da câmara de combustão	=	potência fornecida pela fase gasosa às paredes da câmara

$$\sum m_e h_e = h^0_{f,óleo} + \Delta h_{óleo(Te,298)} +$$
$$+z\left(h^0_{f,O_2} + \Delta h_{O_2(Te,298)}\right) +$$
$$+\frac{x}{18}\left(h^0_{f,H_2O,L} + \Delta h_{H_2O,L(Te,298)}\right) \quad (3)$$

A vazão z, de O_2, compreende a parcela utilizada como fluido de nebulização do óleo e o restante que é utilizado para nebulizar o resíduo líquido e como comburente.

$$\sum m_s h_s = \frac{c}{12}\left(h^0_{f,CO_2} + \Delta h_{CO_2(Ts,298)}\right) +$$
$$+\left(\frac{h}{2} + \frac{x}{18}\right)\left(h^0_{f,H_2O,V} + \Delta h_{H_2O,V(Ts,298)}\right) +$$
$$+\frac{s}{32}\left(h^0_{f,SO_2} + \Delta h_{SO_2(Ts,298)}\right) + \frac{n}{28}\left(h^0_{f,N_2} + \Delta h_{N_2(Ts,298)}\right) +$$
$$+y(h^0_{f,O_2} + \Delta h_{O_2(Ts,298)}) \quad (4)$$

Nas equações acima, $h^0_{f,i}$ representa a entalpia de formação da substância i (kJ/kgmol), no estado de referência (298K, 101,3kPa) e $\Delta h_{i(T,298)} = C_{pi}(T - 298)$, representa a variação de entalpia da substância i entre a temperatura de referência e a temperatura considerada. C_{pi} é o calor específico molar médio (kJ/kgmol K), a pressão constante, da substância i e q_{vc} é a potência transferida às paredes da câmara de combustão por unidade de massa de óleo queimada.

No caso da água, os subscritos L e V se referem às fases líquida e vapor respectivamente.

Para as entalpias de formação foram adotados os valores citados em Van Wylen (1976) e para os calores específicos médios molares foram adotadas expressões polinomiais propostas por Yaws (1976).

A entalpia de formação do óleo, normalmente não encontrada em bibliografia, foi calculada aplicando a eq. (2) à combustão de óleo, sem injeção de água, tal como feito numa bomba calorimétrica e utilizando o poder calorífico superior (41,8 MJ/kg), determinado em laboratório. O valor calculado resultou 231,8 kJ/kg.

POTÊNCIA TRANSFERIDA ÀS PAREDES DA CÂMARA

A câmara de combustão utilizada no trabalho experimental, cujo comportamento se deseja simular, está representada esquematicamente na figura 1. Na sua tampa frontal está acoplado o queimador. Essa tampa, bem como as paredes circunferenciais são construídas em camisa dupla, com resfriamento a água com revestimento interno composto por fibra cerâmica e concreto refratário. A tampa traseira, na qual se acopla o canal de gases, é revestida por material refratário, sem nenhum resfriamento.

Obviamente a região visível da chama onde ocorre a quase totalidade das reações, apresenta temperaturas e composição de espécies químicas bastante diferentes das que prevalecem no restante do volume interno da câmara. No entanto, como as velocidades de descarga dos fluidos no plano do bocal do queimador são muito altas, o jato equivalente resultante promove intensa recirculação de gases no interior da câmara, permitindo que todo o seu interior possa ser considerado um reator perfeitamente misturado.

Thring (1953) propôs um parâmetro, θ, cujo valor está associado à taxa de recirculação de gases, definido da seguinte forma:

$$\theta = \frac{(m_a + m_o)}{m_o}\frac{d_o}{d_f} \quad (5)$$

Onde m_a é a vazão mássica de fluido (por ex. ar) infiltrado ou insuflado através de uma coroa circular concêntrica ao bocal do queimador (neste caso esta vazão é nula), m_o é a vazão do jato equivalente aos vários jatos efluentes do bocal do queimador, d_o é o diâmetro do jato equivalente e d_f é o diâmetro interno da fornalha. Thring constatou que a taxa de recirculação cresce à medida que θ diminui. Hottel (1967) mostrou que para valores de θ menores que 0,1, o comportamento da fornalha se aproxima de um reator perfeitamente misturado. De fato, Jen (1993), trabalhando com esse mesmo queimador, sem utilizar combustível, usando apenas um jato central de ar e jatos periféricos de oxigênio e medindo os teores de O_2 numa malha com cerca de cem pontos no interior da fornalha, mostrou que apenas numa região muito próxima ao bocal do queimador (diâmetro = $4d_o$ e comprimento = $5d_o$) existem grandes gradientes de concentração de O_2. No restante do volume da fornalha a composição é praticamente igual à da mistura efluente.

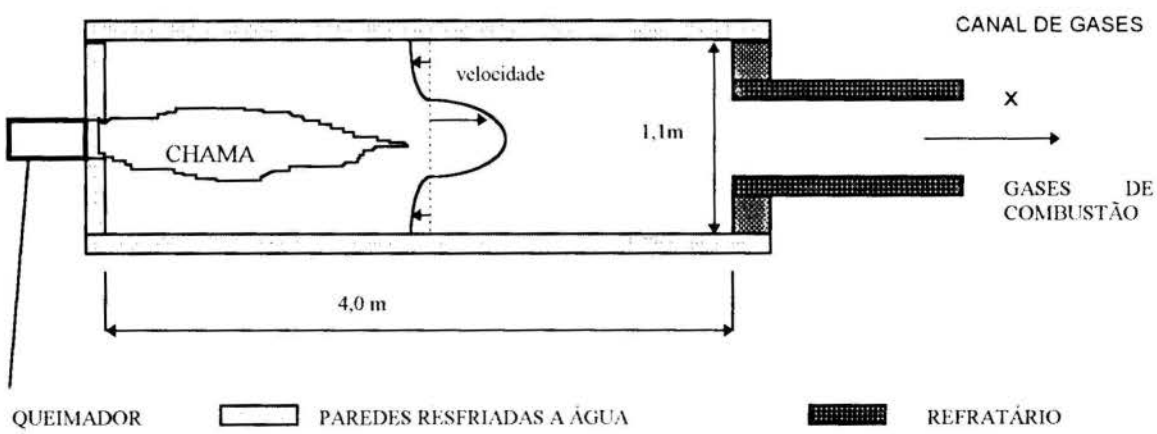


Figura 1- Desenho esquemático da fornalha de testes

A partir dos resultados obtidos nesse trabalho decidiu-se considerar a fase gasosa no interior da câmara de combustão como perfeitamente misturada, utilizando-se os teores de CO_2 e H_2O correspondentes aos produtos de combustão para cálculo das suas propriedades radiativas.

Potência transferida às paredes por radiação térmica. Para o cálculo desta potência foi utilizado o método de zonas. Esse método consiste em dividir o meio gasoso num certo número de volumes, nos quais a composição e temperatura sejam razoavelmente uniformes. Para a superfície interna das paredes resfriadas a água, aqui denominada carga, é feito procedimento análogo, dividindo-a em partes onde as temperaturas e propriedades radiativas sejam também uniformes.

Considerando o exposto anteriormente, decidiu-se considerar todo o meio gasoso como uma única zona. Quanto às superfícies resfriadas (tampa frontal e superfície cilíndrica), dediciu-se considerá-las também como uma única zona, dado que pelo lado de fora elas estão em contato com água à mesma temperatura em todos os compartimentos e, pelo lado de dentro, estão em contato com a atmosfera perfeitamente misturada. A superfície da tampa trazeira foi considerada como refratária (fluxo líquido de calor nulo).

Para uma situação como esta e, considerando adicionalmente que o meio gasoso é cinzento (hipótese esta muito forte), Hottel (1967) demonstrou que a potência trocada entre o meio gasoso e a carga, em presença da superfície refratária, pode ser calculada pela seguinte expressão:

$$Q_r = (GS_1)_R \sigma (T_g^4 - T_1^4) \qquad (6)$$

onde σ é a constante de Stefan-Boltzman ($5{,}767.10^{-11}$ kW/m^2 K^4), T_g é a temperatura da fase gasosa e T_1 é a temperatura da carga. $(GS_1)_R$, denominada área global de troca de calor por radiação entre a zona de gás e a carga, em presença de uma zona refratária, é calculada pela seguinte expressão:

$$(GS_1)_R = \frac{A_T}{\frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{1}{C_s \cdot \varepsilon_1} - 1} \qquad (7)$$

onde A_T é a área total interna da fornalha (carga + refratário), ε_g é a emissividade da mistura gasosa, C_s é a relação entre a área da carga, A_1, e a área total, A_T ($A_T = A_1 + A_R$). A emissividade da superfície da carga é representada por ε_1.

Observe-se que $(GS_1)_R$ tem dimensão de área e sua definição leva em conta: a geometria da câmara, as propriedades radiativas da fase gasosa e da superfície da carga, além da existência de superfícies refratárias, cuja refletividade é admitida igual a 1.

A apresentação detalhada do cálculo dos parâmetros de emissividade é feita no item que trata da análise da influência de parâmetros.

Potência transferida à carga por convecção. É calculada pela seguinte expressão:

$$Q_c = h_c A_1 (T_g - T_1) \qquad (8)$$

onde h_c é o coeficiente de película para troca de calor.

Para o cálculo desse coeficiente é necessário conhecer as propriedades do fluido que escoa junto à parede, bem como a velocidade nas proximidades desta.

Devido à intensa recirculação no interior da câmara, a velocidade axial dos gases é elevada e positiva (sentido de saída dos gases) na região junto ao eixo central. Na região junto à parede cilíndrica resfriada a água, a velocidade é negativa e de pequena magnitude (valores raramente superiores a 0,5 m/s). Adotando uma velocidade de 0,5 m/s e usando a composição dos gases na câmara é possível estimar em 0,0116 kW/m^{2}K o valor de h_c. De qualquer forma, a incerteza do valor de h_c tem pouca influência nos cálculos, uma vez que a parcela de convecção representa apenas cerca de 6% da taxa total de calor trocado (vide tabela 2).

A potência total transferida à carga é obtida pela soma das parcelas de convecção e radiação:

$$Q_{vc} = Q_c + Q_r \qquad (9)$$

onde: $Q_{vc} = m_{oleo} q_{vc}$, na qual m_{oleo} é a vazão de óleo combustível (kg/s)

Condição de contorno. Para calcular as parcelas de convecção e radiação, eq. (6) e eq. (8), é necessário conhecer o valor da temperatura da superfície da carga, T_1. Ocorre que esse valor normalmente não é imposto a priori. Tal valor pode ser calculado impondo que o fluxo líquido de calor incidente na superfície da carga seja igual ao fluxo conduzido através do isolamento térmico existente entre essa superfície e a água de resfriamento das paredes da fornalha. A partir desta imposição, T_1 pode ser calculado por:

$$T_1 = \frac{Q_{vc}}{UA_1} + T_{agua} \qquad (10)$$

onde T_{agua} é a temperatura da água de resfriamento, normalmente imposta por condições de operação do sistema de utilidades.

O coeficiente global é calculado pela eq. (11), rigorosamente válida apenas para geometrias planas, mas aplicável neste caso tendo em vista a pequena espessura do isolamento da superfície da carga frente ao raio da câmara de combustão:

$$U = \frac{1}{\frac{e_1}{K_1} + \frac{e_2}{K_2} + \frac{e_3}{K_3} + \frac{1}{h_a}} \qquad (11)$$

onde e_i e K_i representam respectivamente a espessura e a condutividade térmica de cada camada do isolamento composto e h_a, o coeficiente de película do lado da água.

No caso da fornalha de testes utilizada para os experimentos, os valores de e_i e k_i são: 0,0254 m e 0,0004 kW/mK, para a camada mais interna constituída de fibra cerâmica; 0,015 m e

0,0007 kW/mK, para a camada intermediária de concreto refratário; 0,006 m e 0,035 kW/mK, para a chapa de aço interna da carcaça.

O valor de h_a foi adotado igual a 5,8 kW/m^{2}K, compatível com o escoamento de água em torno da superfície externa da fornalha. Os termos $\frac{e_3}{k_3}$ e $\frac{1}{h_a}$ são praticamente desprezíveis face aos demais.

Observe-se que não foi considerado o coeficiente de película do lado do gás, uma vez que se está explicitando a temperatura da superfície interna do isolamento, T_1.

PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO ADOTADO

Hottel (1967) propôs para este caso um procedimento de solução bastante simples e expedito, baseado numa simplificação da equação de energia, o qual consiste basicamente em considerar que o calor específico médio da mistura dos produtos de combustão é independente da temperatura.

A partir desta simplificação o autor consegue definir 3 adimensionais: Q' (eficiência reduzida de transferência de calor), D' (carga reduzida de superfície, indicativa da capacidade de transferir calor da fase gasosa às paredes da câmara) e τ (relação entre a temperatura da superfície e a temperatura de chama adiabática). Utilizando a equação da energia com essa simplificação, é possível deduzir uma equação que relaciona as três variáveis, o que torna praticamente imediato o cálculo da potência fornecida às paredes, uma vez conhecidos D' e τ.

Essa hipótese simplificadora é razoavelmente boa quando se trata de chamas realizadas com ar. No entanto, em chamas realizadas com oxigênio e adicionalmente com injeção de quantidades consideráveis de água líquida, ela é completamente inadmissível.

De fato, a tentativa de aplicar esse procedimento ao caso presente levou a erros superiores a 30% nos valores da potência fornecida às paredes. Assim sendo, resolveu-se neste caso aplicar um procedimento iterativo de cálculo, utilizando alternativamente a equação de energia na forma completa, eq. (2), (3) e (4).

Uma vez estabelecido o conjunto de equações que governa o fenômeno, tem-se, para uma dada vazão de óleo combustível e uma dada temperatura dos gases efluentes, as seguintes incógnitas a determinar: x, T_1 e Q_{vc}. Para determiná-las foi montada uma planilha de cálculo eletrônica que realiza basicamente o seguinte procedimento:

- Arbitra um primeiro valor para x.
- Calcula as vazões dos produtos de combustão e as pressões parciais de CO_2 e H_2O, utilizando a eq. (1).
- Utilizando gráficos apresentados em Hottel, calcula a emissividade da mistura de gases efluente.
- Calcula o valor da área global de troca de calor por radiação, utilizando a eq. (7).
- Aplica as eq. (2), (3) e (4), calculando q_{vc} e o produto deste por m_{oleo}, resultando Q_{vc}.
- Calcula T_1, utilizando a eq. (10).
- Utilizando as eq. (6), (8) e (9), calcula um novo valor de Q_{vc}, o qual é comparado com o valor calculado a partir das diferenças de entalpia.
- Compara estes dois valores e, por um processo iterativo de cálculo, faz convergir o valor de x, produzindo finalmente valores definitivos de T_1 e Q_{vc}.

A planilha elaborada toma apenas 150 linhas, ou seja, o procedimento é bastante simples.

TRABALHO EXPERIMENTAL REALIZADO

Utilizando uma fornalha de testes com as dimensões mostradas na figura 1, foram realizados experimentos cobrindo a faixa de vazões de óleo de 0,01225 kg/s até 0,02347 kg/s (vazão para a qual se atingiu concentração de CO próxima ao padrão de emissão nos gases efluentes, 100 ppm). Foram medidas, para todas as condições, além da vazão de óleo, a vazão de água injetada (simulando o resíduo líquido), as vazões, temperaturas de entrada e saída da água de resfriamento da carcaça, o que permitiu calcular a potência transferida. A temperatura da fase gasosa foi imposta em cerca de 1500 K, mediante o ajuste da vazão de água injetada, tendo sido medida com pirômetro de sucção inserido no canal de gases. Para quatro dessas condições foi obtido o conjunto de valores mostrado na tabela 1.

COMPARAÇÃO ENTRE OS VALORES MEDIDOS E PREVISTOS PELO MODELO

O procedimento de cálculo apresentado foi aplicado às mesmas condições da tabela 1, resultando os valores mostrados na tabela 2.

Como se pode verificar, a concordância é muito boa para a potência transferida e bastante ruim para a relação x. Para esta última variável, o erro aumenta à medida que a potência de operação aumenta. Porém os erros nesta variável estão nos valores medidos e não nos valores previstos pelo modelo. De fato, tomando os valores de T_s, x, teor de O_2 e m_{oleo} da tabela 1 e calculando as entalpias dos fluxos de entrada e saída, verifica-se que a potência total transferida deveria ter os seguintes valores: 224, 164, 114 e 89 kW, para as condições 1, 2, 3 e 4, respectivamente. Tais valores são bastante diferentes dos valores medidos de Q_{vc} (vide tabela 1).

Observe-se que para o cálculo destes valores foram utilizadas apenas a conservação de massa e energia e, portanto, eles não estão afetados pelas hipóteses feitas no modelo de transferência de calor.

Além disso, considerando as medições de Ts (feitas com pirômetro de sucção, elemento padrão), do teor de O_2 (feitas com analisador contínuo, calibrado diversas vezes durante o ensaio) e de vazão de óleo (feitas com medidor previamente calibrado em toda a faixa de trabalho), fica assegurada a pequena incerteza dos valores dessas variáveis. Por exclusão, a vazão de água alimentada, a partir da qual foi determinada a variável x, resulta como variável mais suscetível de erro de medição.

INFLUÊNCIA DE PARÂMETROS

A seguir é feita uma análise da influência de parâmetros importantes geométricos e de processo, no valor da potência transferida às paredes e na relação x.

Potência de operação. Como se pode depreender, tanto dos valores medidos quanto dos calculados, à medida que a potência de operação, H_F, aumenta, a potência transferida às paredes fica aproximadamente constante e a fração de H_F que é transferida para as paredes resfriadas, diminui. Este comportamento concorda qualitativamente com os resultados apresentados por Hottel no seu modelo simplificado, mencionado anteriormente. No limite, para muito altas potências de operação, essa fração se aproxima de zero, o que corresponderia ao caso de um reator adiabático. Para este caso limite, fazendo q_{vc} igual a zero na eq. (2) e impondo T_s = 1500 K nas eq. (3) e (4), obtém-se x = 6,27. Então, para valores muito altos de m_{oleo}, o modelo deve prever valores de x que se aproximam desse limite. De fato fazendo m_{oleo} = 0,1 kg/s e mantendo os demais parâmetros, o valor de x previsto pelo modelo é 6,097.

Emissividade da mistura gasosa. Este parâmetro é função de L_m (comprimento médio do feixe de radiação), das pressões parciais de CO_2 e de H_2O, da temperatura da mistura gasosa e da própria pressão total. O comprimento médio do feixe de radiação é definido como:

$$L_m = 3{,}5\frac{V}{A_T} \qquad (12)$$

onde V é o volume interno da câmara de combustão.

A pressão total, neste caso é fixada, praticamente igual à atmosférica.

Quanto às pressões parciais de CO_2 e H_2O elas são bastante diferentes, à medida que x varia. No entanto, para as várias condições ensaiadas, o valor de ε_g calculado se situa entre 0,32 e 0,36. Considerando fixados os demais parâmetros, pode-se verificar através da eq. (7) que a estes valores extremos correspondem valores de $(GS_1)_R$ de 3,696 e 4,025 m^2, respectivamente.

À primeira vista, pela inspeção da eq. (6), seria previsível um aumento considerável no termo de radiação e, portanto, em Q_{vc}.

No entanto, como a temperatura de saída, T_s, está fixada, o resultado é o seguinte: Q_{vc} aumenta de 179,5 kW para 180,2 kW (0,4%), x diminui de 3,65 para 3,636 (0,35%) e T_1 sobe de 1418 K para 1423 K (0,35%). Fica claro portanto que a temperatura T_1 é que limita o valor de Q_{vc}.

Como resultado, pode-se concluir que variação considerável de ε_g (aumento de 12,5%) tem efeito desprezível sobre Q_{vc} e x.

Tabela 1 - Resultados obtidos no trabalho experimental

VARIÁVEL	CONDIÇÃO 1	CONDIÇÃO 2	CONDIÇÃO 3	CONDIÇÃO 4
Vazão de óleo (kg/s)	0,01225	0,01530	0,02097	0,02347
H_F = potência de operação (kW)	514	643	881	985
Temperatura do óleo (°C)	169	160	170	164
x (kg água/kg óleo)	2,82	4,24	5,34	5,66
teor de O_2 (b.s.) nos gases efluentes(%)	5,1	5,8	6,2	5,2
Q_{vc}= pot. total transferida (kW)	183	193	182	178
Eficiência = Q_{vc}/H_f	0,35	0,30	0,21	0,18
Temperatura dos gases =Ts (K)	1483	1493	1473	1473

Tabela 2- Valores previstos pelo modelo

VARIÁVEL	CONDIÇÃO 1	CONDIÇÃO 2	CONDIÇÃO 3	CONDIÇÃO 4
Q_{vc} = pot. total transferida (kW)	180,8	181,3	178,1	178,1
Q_r = parcela de radiação (kW)	170,3	171,0	169,3	169,3
Q_c = parcela de convecção (kW)	10,5	10,3	8,8	8,8
T_1= temp da sup. interna (K)	1422	1433	1411	1411
x (kg água/kg óleo)	3,64	4,16	4,90	5,08
erro em Q_{vc} =(Q_{vccalc}-Q_{vcmed})/Q_{vcmed} (%)	-1,2	-6,0	-2,1	+0,05

Emissividade da superfície resfriada. Todos os cálculos foram realizados com o valor deste parâmetro igual a 0,5 (valor fornecido pelo fabricante). No entanto é fato conhecido que ε_1 é função do próprio estado físico da superfície e da temperatura desta, T_1. Admitindo um aumento de 60% neste parâmetro, fixados os demais parâmetros da eq. (7) e ε_g = 0,32, tem-se o seguinte resultado: Q_{vc} aumenta de 179,5 para 181,5 kW (1,1%), T_1 aumenta de 1418 K para 1429 K e x diminui de 3,65 para 3,619 (0,8%). Ou seja, grandes variações na emissividade da superfície, têm pouco efeito sobre Q_{vc} e x. Seu efeito se dá novamente sobre T_1, a qual, como visto, limita o valor de Q_{vc}.

Relação entre a área da superfície resfriada e a da superfície total interna. No caso da fornalha utilizada para o trabalho experimental, o valor de C_s é 0,9395, ou seja quase toda a superfície interna é resfriada. Imaginando uma redução de C_s para 0,87 e fixando-se ε_1 = 0,5 e ε_g = 0,32, obtém-se: redução de Q_{vc} de 179,5 kW para 166,6 kW (7,2%), aumento de T_1 de 1418 para 1420 K (0,14%) e aumento de x de 3,65 para 3,858 (6,0%).

É interessante observar que quanto mais se reduz C_s, o que significa reduzir A_1 e aumentar A_r, a fornalha se aproxima de um reator adiabático. Então é natural que Q_{vc} se reduza e x aumente sensivelmente com a redução de C_s. Por outro lado, a variação deste parâmetro tem pouca influência em T_1.

Coeficiente global de transferência de calor, U. Este parâmetro tem influência considerável sobre os valores de Q_{vc} e x. Por exemplo baixando seu valor de 0,0112 kW/mK (valor utilizado nos cálculos) para 0,01 (cerca de 10%), resulta para a condição 1, mantidos os demais parâmetros: Q_{vc} = 161,5 kW (redução de 10%); x = 3,9428 (aumento de 8%) e T_1 = 1425 K.

Este é justamente um ponto fraco do procedimento proposto, já que para sua aplicação é preciso conhecer, com razoável precisão, os valores das condutividades térmicas, os quais freqüentemente não são disponíveis em bibliografia. Para o caso presente, alguns valores foram obtidos de fabricantes e outros foram extraídos do Data Book da General Electric (1978).

Temperatura da água de resfriamento, $T_{água}$. Em todas as condições calculadas, a temperatura da água de resfriamento foi mantida em 333 K na eq. (10), que corresponde à temperatura de saída (retorno à torre de resfriamento). Pode-se argüir que na entrada dos compartimentos de resfriamento essa água está a temperatura de cerca de 303 K, o que colocaria o seguinte problema: que temperatura utilizar na eq. (10)?

Para verificar o erro derivado do uso da temperatura de saída, pode-se usar o valor de entrada, o que resultaria, para a condição 1, o seguinte: aumento de Q_{vc} de 179,5 kW para 184,1 kW (2,5%), redução de T_1 de 1418 K para 1416 K (0,14%) e redução de x de 3,65 para 3,575 (2,0%).

Portanto, a utilização da temperatura de entrada ou de saída da água na eq. (10) altera pouco os resultados finais.

CONCLUSÕES

Foi desenvolvido um procedimento de cálculo muito simples, a ponto de poder ser executado em planilha eletrônica, que pode ser utilizado para a predição expedita de condições operacionais destes equipamentos. Nestas situações, a utilização de programas muito sofisticados, como o PHOENIX® ou FLUENT®, os quais requerem condições de contorno razoavelmente difíceis de impor, provavelmente seria muito mais trabalhosa que a utilização do procedimento aqui apresentado.

O bom funcionamento do procedimento de cálculo proposto para chamas realizadas com ar não seria surpreendente, já que na região visível da chama, as temperaturas são apenas moderadamente mais altas que aquelas correspondentes à região de recirculação. No entanto é surpreendente que mesmo no caso de chamas a oxigênio, nas quais as diferenças de temperatura entre as regiões anteriormente citadas é muito alta, a concordância seja tão boa. Isto se deve, em grande parte ao efeito atenuador da radiação infravermelha emitida pela região visível da chama, através da camada anular constituída por CO_2 e H_2O, a qual tem, neste caso, alta absorvidade, devido às concentrações elevadas destas duas substâncias.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

General Electric Company, 1978 "Heat Transfer and Fluid Flow Data Books".

Hottel, H.C. & Sarofim, A.F., 1967, "Radiative transfer" Mc Graw Hill.

Jen, L.C. et al, 1993, "Levantamento Experimental de Parâmetros Relativos à Expansão e mistura de Jatos Efluentes de Queimadores Oxi-Combustíveis". Relatório IPT nº 31.185.

Thring, M.W. & Newby, M.P., 1953, "Combustion Length of Enclosed Turbulent Jet Flames" 4th International Symposium on Combustion, pp. 789-796.

Van Wylen, G.J. & Sonntag, R.E.,1976, "Fundamentos da Termodinâmica Clássica", Tradução da segunda edição em inglês, Editora Edgard Blucher Ltda.

Yaws, C.L. et alii, 1976, "Correlation constants for chemical compounds" Chemical Engineering, Aug, 16, pp. 79-87.

SUMMARY

The aim of this work was to verify the possibility of modelling the heat transfer phenomena inside an incinerator for liquid wastes mainly constituted from water, assuming the flame and the combustion products around it as being a perfect-stirred gas volume inside the furnace. The results obtained have shown that despite its simplicity, the model predicts quite well the power transferred to the cooled surface and the ratio between waste liquid and oil rates.

ACOUSTICAL AND LDV VELOCITY MEASUREMENTS ON PREMIXED FLAMES: INVESTIGATION OF COMBUSTION FLICKERING AT DIFFERENT REYNOLDS NUME

N. Paone, G.M. Revel, E.P. Tomasini

Dipartimento di Meccanica
Università degli Studi di Ancona
Via Brecce Bianche, 60131 ANCONA, ITALIA

SUMMARY

In this work different measurement techniques for flickering and unsteadiness combustion monitoring have been tested and discussed. In particular, acoustic sound pressure level and LDV velocity measurement techniques have been chosen for this task. The experiments have been performed on a premixed unconfined CH_4 flame produced by a Bunsen burner at different Reynolds numbers in a range between 500 and 2500. Acoustical and velocity measurement results are processed in the frequency domain; correlation is employed in order to validate measurement results and to improve understanding of the combustion processes.The two measurement techniques seem to be both suitable for monitoring premixed flame oscillations.

INTRODUCTION

In the last few years many attempts have been made to find a correlation between combustion acoustic noise, fluidynamics, and chemical mechanisms regulating combustion processes. The main goal of these studies is to better understand the flame instability phenomenon, often acoustically coupled, which produces an increase in heat transfer rates at the combustor walls and induces large scale vibrations, and the pulsating combustion, largely investigated for fuel savings and emissions reduction.

The experimental approach seems to be the most suitable to describe these phenomena, because, in spite of the large number of theoretical studies, a strict model of reactants turbulent mixing and chemical kinetics, connected with heat release and pressure oscillations acting within the flame, has not been successfully formulated yet. Due to the complexity of the phenomena, it is relevant to choose properly which quantities should be measured and the appropriate measurement techniques to be employed. The harsh environment of the flame poses severe questions on most measurement techniques, thus affecting uncertainty and overall reliability of results. The measurement of different quantities and the correlation of experimental data is a valuable procedure to improve quality of the analysis.

In particular, jet diffusion flame flow structures have been largely investigated by employing different topological techniques. Lewis et al. (1988) have used Particle Tracking Velocimetry (PTV) to determine streamlines and vortical structures on a laminar non-premixed flame in an unsteady vortical reacting flow; Strawa and Cantwell (1989) have studied an acoustically excited jet diffusion flame by performing flow visualization (by superimposing the luminous image of the flame on its schlieren image) and phase-conditioned velocity measurements with a one-component Laser Doppler Velocimeter LDV measurement system; Lecuona et al. (1992) have shown two and three dimensional vortex shedding in a jet diffusion flame by employing pulsed laser light sheet illumination and photographic acquisition (the flame was perturbed axially by periodic pressure pulses and azymuthally by producing a corrugation at the mouth of the nozzle).

The results of these studies are quite in agreement with each other: topological methods can be usefully employed to characterize the structure of the vortices which are periodically generated from density decrease, viscosity enhancement, fluid acceleration and ricirculation, and external air intake. Flickering natural frequency is typically in the range of 10 and 20 Hz (with Strouhal number between 0.25 and 0.5) and it is established by predominance of buoyancy forces on jet inertia forces.

It is well known that heat realize is coupled with generation of pressure waves and therefore the described phenomena may be seen in connection with combustion noise, though mechanisms by which combustion noise is generated are still not completely clear.

Many chemical and physical factors contribute to production and propagation of combustion noise (e.g., flow velocity, turbulence scales, combustor geometry and acoustic resonance frequency, fuel type, interaction between pressure waves and flame front, etc.) and different theories have been formulated about their role (e.g., Strahle, 1972; Chiu and Summerfield, 1974; Narasimhan, 1986).

Shivashankara et al. (1975) have shown that acoustical noise in flames is strictly coupled with C_2-radical emission and recently many experiments have been successfully performed to correlate optical and acoustical measurements in reacting flows (e.g., Poinsot et al., 1987; Schadow et al., 1994) with the goal of describing flame instabilities.

On premixed flames, velocity measurements and flow visualizations have been successfully performed (Mungal et al., 1994; Paone et al., 1996) by employing Particle Image Velocimetry (PIV). Comparisons with LDV measurements (Paone, 1994) have shown differences of velocity measured values in the order of 10%, but it is worth noting that PIV measures an instantaneous value, while LDV measures a value averaged on thousands of samples: therefore PIV and LDV are strictly complementary measurements techniques suitable for premixed flames study and monitoring.

From PIV images it is possible to obtain instantaneous streamlines in the flame. The flow is deviated and stretched from the acceleration due to the reactions occurring in the flame front, where vorticity and strain rates peak at their maximum value. Downstream of the flame front, hot burnt gases are convected in large eddies.
In this case pressure waves production is regulated from combustion rate, which changes according to the flow speed and to the equivalence ratio. The flow speed, and then the Reynolds number, determines the turbulence level in the flow and therefore establishes mixing mechanisms and flame velocity, while the equivalence ratio is important for the quantity of secondary diffusive air, necessary to complete oxidization reactions, and for heat release. All these factors contribute to determine flame front shape and position, combustion rate and periodic pressure wave generation.
The topological techniques above described allow to study in detail these phenomena also in the time domain, if image acquisition is performed with a sufficiently high sample rate. Unfortunately, they need long processing time and so they are not suitable for monitoring flame oscillations. Therefore, recently many attempts have been made to study the combustion instabilities and pulsation by measurement of scalar and vectorial quantities in the frequency domain (Durao et al., 1996; Zangl et al., 1996). The knowledge of such quantities is of paramount importance also to improve understanding of the combustion flickering process.
In this paper the following quantities have been chosen for measurement: gas velocity (using LDV anemometry) and acoustic sound pressure level (using microphones). This choice is made on the basis that velocity oscillations are related to pressure fluctuations and the simultaneous measurement of the two quantities should provide correlated results, i.e. redundant information on the combustion process.
Redundancy of data is relevant to reduce uncertainty in results of experimental analysis.
The experiments have been performed on a premixed unconfined CH_4 flame produced by a Bunsen burner.
Acoustical and LDV velocity measurements have been realized at different Reynolds numbers, in order to observe the relationship between the oscillations of the flow speed and acoustical frequency spectra at the nozzle exit and downstream of the flame front.
Reynolds number has been varied by regulating air flow rate. Since the CH_4 flow rate can not be regulated in the experimental facility here employed, equivalence ratio has also been consequently modified.
Air flow rate range has been set in such a way as to observe the transition between a typical buoyant flame, very near to be diffusive ($Re = 515$, $\phi = 0.31$), and a typical turbulent premixed flame, dominated by inertia forces ($Re = 2520$, $\phi = 0.92$).
In these different conditions, the flickering of the flame has been observed and correlated to velocity and acoustical measured frequency spectra.

EXPERIMENTAL FACILITY

The experimental facility is schematically shown in Fig. 1. The flame is produced from a Bunsen burner operating with CH_4. The burner is equipped with a tube (17 mm internal diameter, 806 mm length) mounted on the nozzle (80 mm length), in such a way as to have a fully-developed flow at the tube exit.
The burner is surrounded by a cylindrical settling chamber (200 mm internal diameter, 95 mm height) where primary air is conveyed. The air is seeded for LDV measurements by using TiO_2 particles and a TSI atomizer.

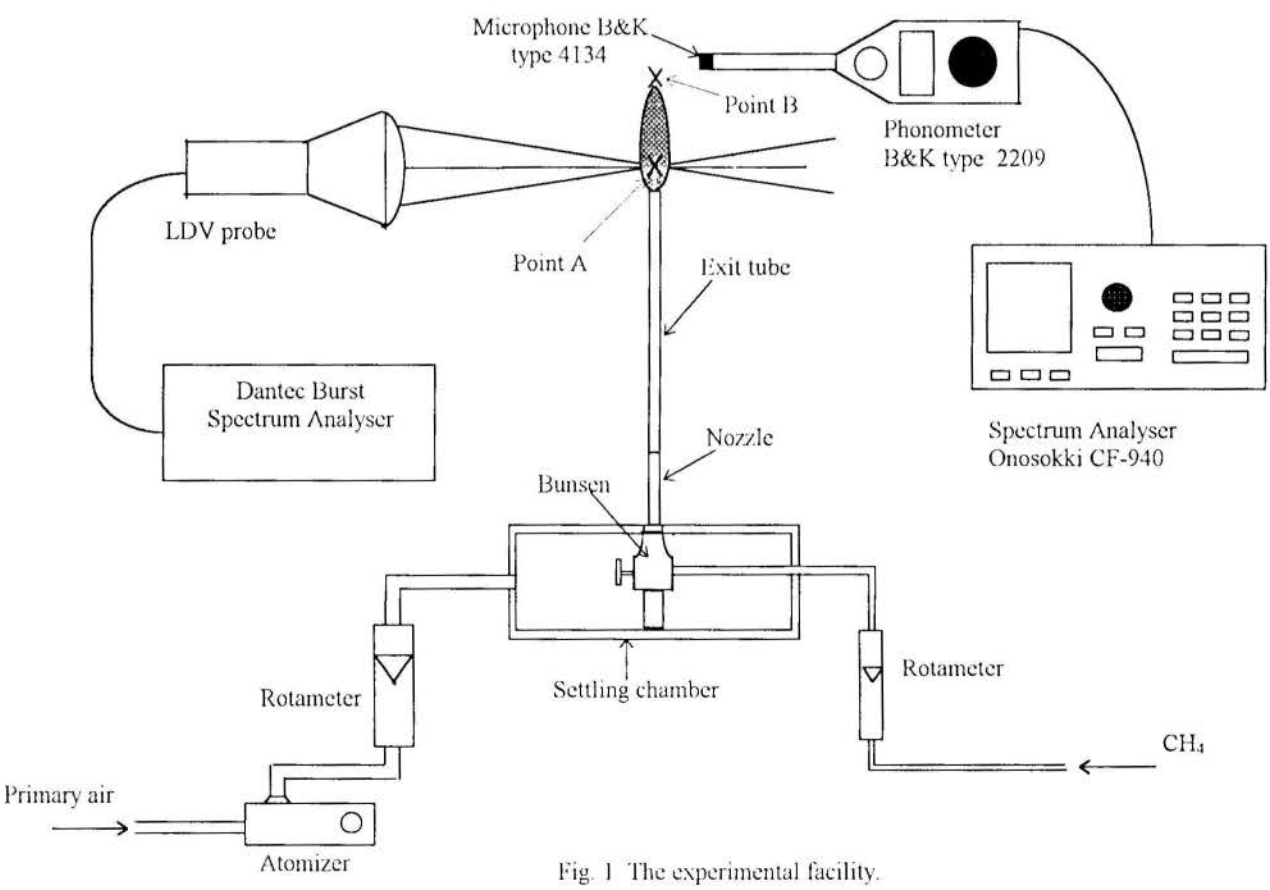


Fig. 1 The experimental facility.

The particles employed has an average diameter of about 0.2 μm, with a density of 3.5×10^5 kg/m^3; the maximum frequency of hot gas velocity fluctuations, which can be followed by those particles with an error lower than 1 %, is about 40 KHz (Drain, 1980).
Air and methane flow rates are measured by rotameters, whose measurement uncertainty is 5 % of reading.

LDV MEASUREMENTS

Velocity measurements have been performed in the flame by using an ion Argon laser (4 W power) connected to fiber optics two-component (with wavelength of 488 nm and 514.4 nm) LDV system with Burst Spectrum Analyzer for signal processing. A 310 mm focal length lens have been used to collect the scattered light, with a measuring volume of 2.6 mm of length and 0.14 mm of diameter.
Three different conditions of the flame have been studied:
1) average flow speed: 0.52 m/s, Re = 515, $\phi = 0.31$ (flow rates: 8.10 l/min air, 2.75 l/min CH_4).
2) average flow speed: 1.74 m/s, Re = 1720, $\phi = 0.53$ (flow rates: 13.9 l/min air, 2.75 l/min CH_4).
3) average flow speed: 2.55 m/s, Re = 2520, $\phi = 0.92$ (flow rates: 24.2 l/min air, 2.75 l/min CH_4).
For each condition, velocity has been measured in two different points in the axis of the flame: inside the flame cone (point A, Fig. 1), at 10 mm from the exit tube, where there is no combustion, and just above the flame front tip (point B, Fig. 1), at a distance from the tube exit different in the three conditions, according to the flame length, which varies between 300 mm (cond. 1) and 150 mm (cond. 3).
Since we were interested in the periodic velocity fluctuations in the frequency domain, we have acquired for each point 20000 samples and we have performed acquisition in such a way as to have Data Rate (i.e. the frequency of arrival of the samples) and Data Valid (i.e. the percentage of the acquired samples which is accepted by the processing system) as high as possible, so that a wide frequency band could be analyzed in the results.
After resampling of the acquired time series at constant ΔT given by the mean Data Rate (normally LDV raw data are not equally spaced in time), the Fast Fourier Transform algorithm can be correctly applied to calculate the velocity spectra.
In order to increase Data Rate, seeding density, laser power and signal voltage to the photomultipliers have been accurately set. Both the axial and the radial velocity components were measured, but here only results concerning axial (vertical) component are discussed, because they are more significant.
In Table 1 main LDV data results are reported.

Table 1 - LDV data results for the axial velocity component.

Condi-tion	Point	Vmean m/s	D. Rate KHz	Data Valid	V RMS m/s	Turbu-lence
1	A	0.76	9.115	89 %	0.03	4.74 %
1	B	3.11	2.558	45 %	0.60	19.4 %
2	A	2.42	9.810	95 %	0.12	5.23 %
2	B	3.22	2.496	52 %	0.66	20.8 %
3	A	3.46	11.722	92 %	0.32	9.39 %
3	B	3.96	3.582	50 %	0.72	18.3 %

The useful frequency band observable by LDV data depends on the Data Rate, which clearly decreases above the flame front (point B), because of the lower seeding density caused by particle combustion. In the worst cases (cond. 1 and 2, point B), a bandwidth of about 1 KHz is given by the processing software for FFT according to sampling theorems.

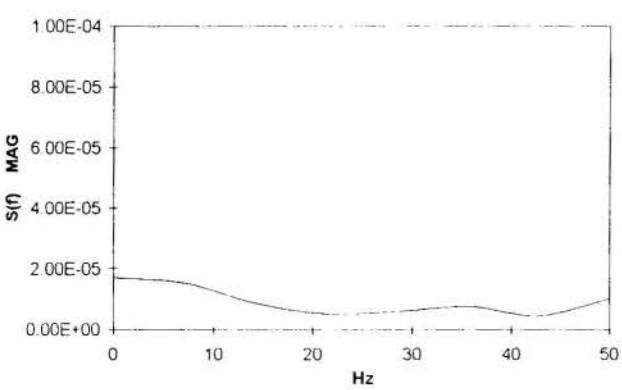


Fig. 2 - LDV velocity spectrum in point A, condition 1.

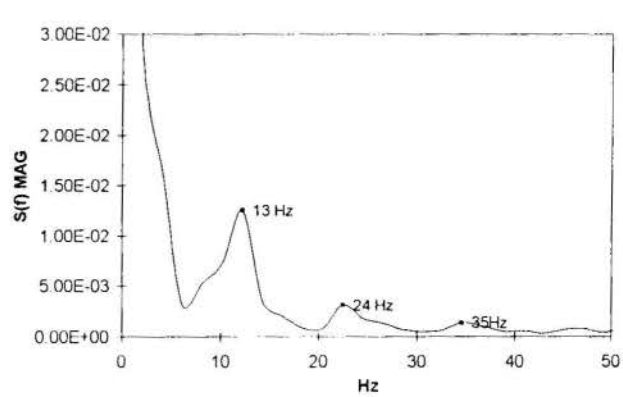


Fig. 3 - LDV velocity spectrum in point B, condition 1.

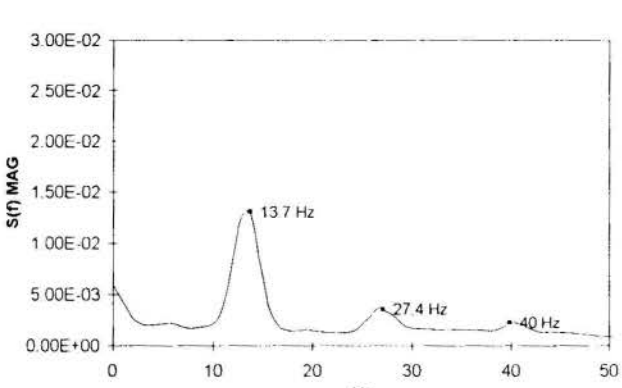


Fig. 4 - LDV velocity spectrum in point B, condition 2.

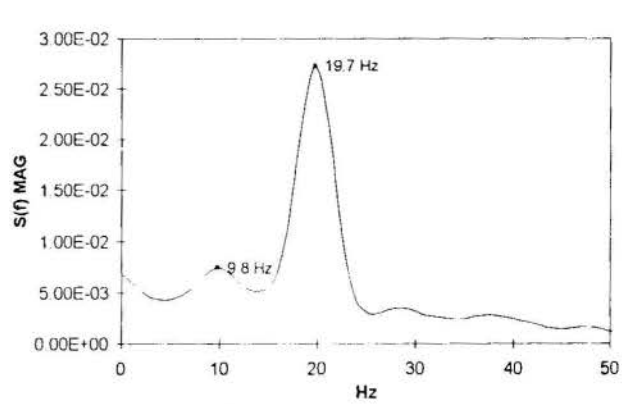


Fig. 5 - LDV velocity spectrum in point B, condition 3.

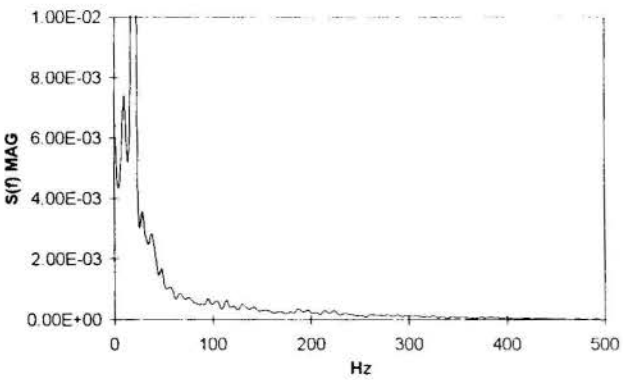


Fig. 6 - LDV velocity spectrum of Fig. 5 (point B, condition 3) with the scale from 0 to 500 Hz.

In Fig. 2 the velocity spectrum measured inside the flame cone (point A) in condition 1 is shown: the flow coming out from the tube does not present particular fluctuation around its mean value (0.7649 m/s).

The frequency velocity spectrum magnitude (S(f) MAG) is presented in an arbitrary scale, as the standard Burst Ware Dantec software usually does. Because of that, only qualitative results are given, but they are sufficient for our purposes. On the contrary, the frequency scale (here as in the following spectra) is reported in a range from 0 to 50 Hz, because only in this range significant velocity fluctuations have been observed. Above 50 Hz, the spectra decrease progressively and reach zero between 500 and 700 Hz.

The spectrum measured in the same condition, but in the point above the flame tip, presents a significant fluctuation at 13 Hz (Fig. 3), which also seems to have 2nd and 3rd harmonics. It is worth noting that in Fig. 3 the amplitude scale is two orders of magnitude larger that in Fig. 2.

When Reynolds number increases, together with average flow speed and equivalence ratio (condition 2), the velocity fluctuation frequency and its 2nd and 3rd harmonic enhance too in the point above the flame front (Fig. 4), while in point A, inside the flame, a spectrum very similar to that in Fig. 2 has been observed, with no significant oscillations.

In condition 3 the same behaviour has been found, with a flat spectrum in point A and a peak at 19.7 Hz in point B (Fig. 5). It is difficult to understand whether it is the first or the second harmonic, because the velocity amplitude presents a small peak also at 9.8 Hz.

We noted that, although the average flow speed difference between condition 2 and 3 is less than between condition 1and 2, the fluctuation frequency shift is more significant between condition 2 and 3.

In Fig. 6 the spectrum of Fig. 5 is reported in a frequency range from 0 to 500 Hz, in order to show an example of the acquired spectra behaviour at higher frequency: as previously stated, they progressively decrease to zero at about 500 Hz.

ACOUSTICAL MEASUREMENTS

In the same conditions, acoustical measurements have been performed by using a Bruel & Kjear sound level meter type 2209, equipped with a Bruel & Kjear capacitor microphone type 4134, which has a useful frequency range between 3 Hz and 20 KHz. The acquired signals have been analyzed by means of an Onosokki spectrum analyzer CF - 940 with 400 lines resolution; two range have been analyzed, 5 - 50 Hz and 0 - 1000 Hz, with frequency resolution of 0.125 Hz and 2.5 Hz.

Strhale (1972) has shown that combustion noise does not present directionality for wavelengths longer than the flame characteristic dimension. Consequently, since we were mainly interested in the low-frequency range, we have chosen to perform acoustical measurements in a fixed point at 250 mm from the tube exit and at 100 mm from the burner axis, with the sound level meter always in the same horizontal position (see Fig. 1). Therefore no distinction between point A or B will be necessary for acoustic sound pressure measurements.

32 averages in frequency domain have been performed for each acquisition so that random noise is smoothed out. The conversion factor between voltage and pressure is 1volt = 0.0002 μbar.

In Fig. 7 - 8 the acoustical spectra measured in condition 1, at low and at high frequency, are shown. The low frequency spectrum (Fig. 7) is very similar to the velocity spectrum in the same condition (Fig. 3), with peak values at 12.9 Hz and at 26 Hz (2nd harmonic). In Fig. 8 three dominant peaks are present (175 Hz, 437.5 Hz, 525 Hz) and the level is near zero in the remaining part of the considered bandwidth: in this condition the sound pressure level is generally very low, almost not audible by human ears.

In condition 2 (Fig. 9 - 10) the first peak moves at 13.3 Hz with the second harmonic at about 26 Hz; at higher frequency a significant amplitude value appears at 218 Hz, while the peaks at 437.5 Hz (which is the 2nd harmonic of 218 Hz) and at 525 Hz decrease, yet remaining visible. We have noted that this behaviour is repeatable performing measurements several times, with a standard deviation of about 2-3 %. This is in agreement with the uncertainty estimated after calibration.

In condition 3 (Fig. 11 - 12) the flame becomes very turbulent, noisy and its length decreases. In the high frequency spectrum (Fig. 12) it is possible to note that the whole sound pressure level is enhanced and the three peaks, above mentioned, are still present, but tend to be hidden in a wide band continuos spectrum. At low frequency (Fig. 11) the harmonics at about 10.5 Hz and at 20.2 Hz are predominant. This behaviour is very similar to that observed for the LDV spectra in the same condition.

ANALYSIS OF THE RESULTS

LDV and acoustical measurements results appear to be strictly related. At low frequency the peak values are found to be at the same frequencies between 13 and 20 Hz and in both cases these frequencies increase with Reynolds number and equivalence ratio. In both measurements, also 2nd and 3rd harmonics have been found.

This correspondence between velocity and acoustical measurements results in a range between 10 and 20 Hz is due to the periodic pressure waves generation connected to vortices detachment, which is, as previously stated, established by Reynolds number and equivalence ratio (i.e. by the fluidyamics and chemical mechanisms regulating combustion and heat release rates).

In order to improve understanding of the combustion flickering process, in the future further experiments will be performed varying separately the Reynolds number and the equivalence ratio, in such a way as to correctly estimate the influence of these two variables.

It is interesting to note that the flame has been studied in the transition range from the dominion of the buoyant forces to that of the inertia forces. Usually, the relative importance of buoyancy and inertia forces is measured by the Richardson number (Ri), which is defined as:

$$Ri = Gr / Re^2 \qquad (1)$$

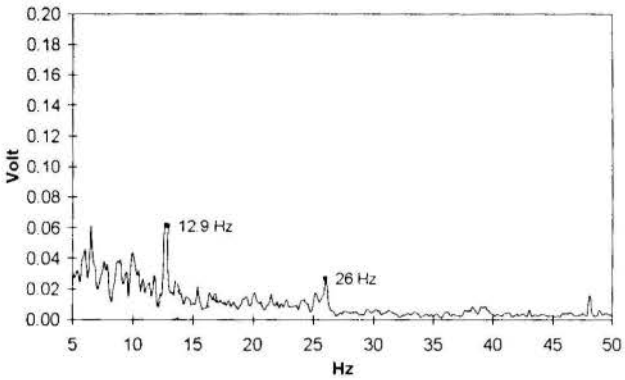


Fig. 7 - Acoustical frequency spectrum in condition 1 (5 - 50 Hz).

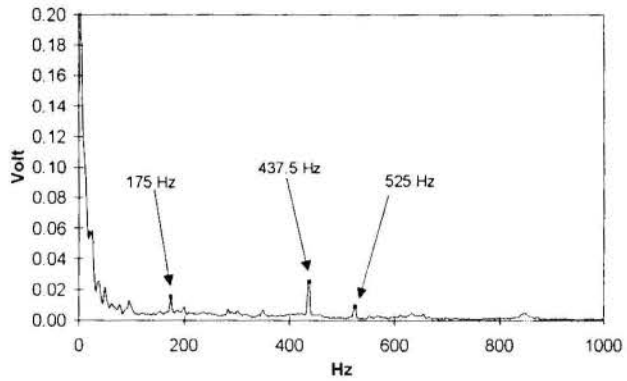


Fig. 8 - Acoustical frequency spectrum in condition 1 (0 - 1000 Hz).

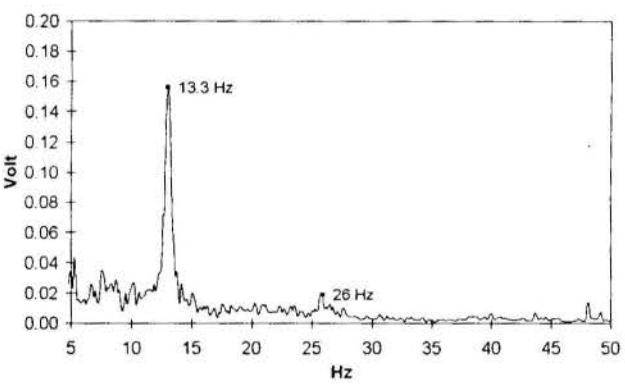


Fig. 9 - Acoustical frequency spectrum in condition 2 (5 - 50 Hz).

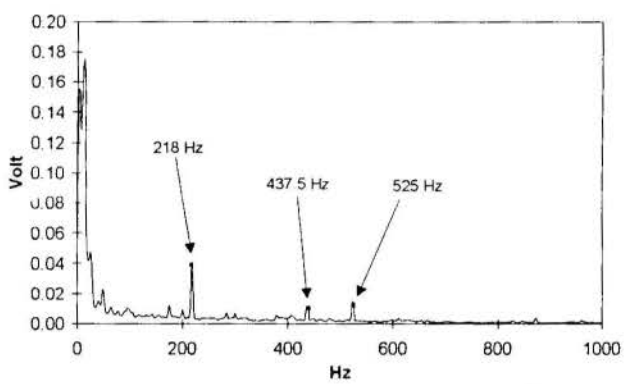


Fig. 10 - Acoustical frequency spectrum in condition 2 (0 - 1000 Hz).

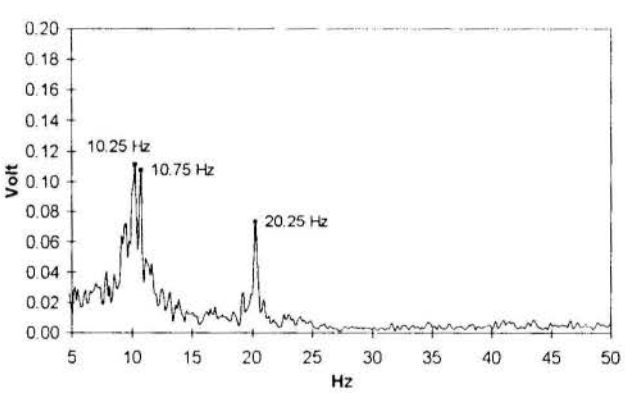


Fig. 11 - Acoustical frequency spectrum in condition 3 (5 - 50 Hz).

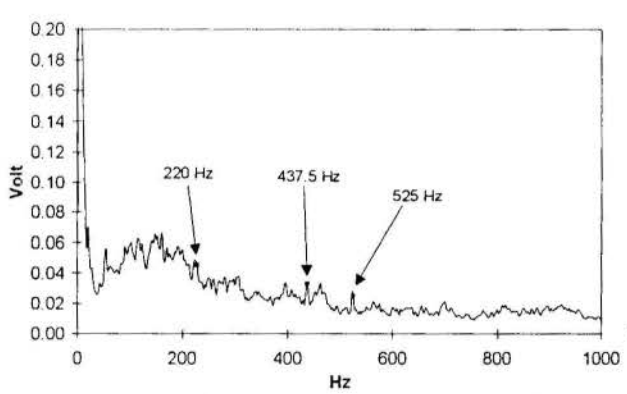


Fig. 12 - Acoustical frequency spectrum in condition 3 (0 - 1000 Hz).

where Gr is the Grashof number and Re the Reynolds number. In general buoyancy forces dominate in flows where $Ri \geq 1$. Ri may be calculated also (e.g. see Strawa and Cantwell, 1989) as the ratio of the square of the timescales associated with inertial phenomena ($\tau_1 = d/U$, where d is the jet diameter and U is the average flow speed) and with buoyancy phenomena ($\tau_2 = (d/g')^{1/2}$, where $g' = (\rho_{FS} - \rho_H / \rho_H)g$ is the effective gravitational acceleration present in the flame; ρ_{FS} is the density of the free-stream air and ρ_H is the density of the hot combustion gases). In practice, τ_1 is the time it would take for the jet fluid to convect one jet diameter, while τ_2 is proportional to the time it would take for the jet to convect one jet diameter under the effective gravitational acceleration. Therefore:

$$Ri = (\tau_1 / \tau_2)^2 \qquad (2)$$

Using Eq. (2), Richardson number has been calculated in the three studied conditions and results have been reported in Table 2, together with the equivalence ratio and the Reynolds and the Strouhal numbers.

Table 2 - Characteristic numbers of the flame in the three studied conditions.

Condition	ϕ	Re	Ri	St
1	0.31	515	5.12	0.425
2	0.53	1720	0.91	0.133
3	0.92	2520	0.45	0.131

In condition 1 the flame is typically dominated by buoyancy forces (Ri > 1). It appears clear also by looking at the flame: its low-frequency natural flickering is evident and its mixing and reacting mechanisms seem to be very similar to those previously described for a diffusive flame. It is confirmed also by the low equivalence ratio. The flame is about 300 mm high, due to the low burning velocity (comparable to flow speed) caused from the poor mixing efficiency typical of these conditions.
Condition 2 is characterized by the transition, while in condition 3 the jet inertia forces become completely dominant: the mixing between air and fuel is now regulated by the turbulence generated in the flow, the burning rate increases and because of that the flame gets shorter. The equivalence ratio is near to 1 and therefore the second diffusive air flow rates decreases.
In this condition velocity and acoustical spectra become very similar to those of a turbulent jet, with a significant level in a broad frequency band.
The experiments here performed confirm this typical behaviour (see Fig. 12) and additionally show that natural flickering frequency shifts significantly when Reynolds number increases in the range where the flame becomes completely turbulent.
In fact, between condition 2 and 3 there is an increase of the frequency peak more relevant than between condition 1and 2 (where transition occurs), though the increase of the flow speed is lower. Therefore we think that this behaviour is mainly due to the real change in the mechanisms regulating mixing and combustion processes.
It is worth noting also that the Strouhal number seems to become constant when the flame is completely premixed and turbulent. Unfortunately, we could not verify whether this behaviour persists at higher Reynolds numbers, because in condition 3 the flame is near to blow up for any further flow rate increase.
The peaks present in the acoustical spectra at higher frequency (218 Hz, 437.5 Hz and 525 Hz) are probably due to the resonance of the tube, which is estimated to be around 210 Hz. This interpretation could explain also why those peaks do not change for different flow conditions.

CONCLUSIONS

This work discusses an experimental approach to the measurement of combustion flickering of a CH_4 premixed flame from a Bunsen burner, at different Reynolds numbers, with the main goal of determining the physical quantities to be measured in order to monitor unsteadiness in combustion processes. Since unsteadiness is strictly related to heat release and combustion rate and efficiency, its monitoring and control is of paramount interest and it has been largely studied in the last years.
The experiments performed have shown that both LDV flow velocity and combustion noise measurements are suitable for this task, because they are both non-intrusive and describe phenomena in time and frequency domain. In particular pressure waves oscillations measurements may be easily employed for in-field monitoring of big industrial burners. Results obtained by independent measurement of different quantities are well correlated, therefore they confirm the applicability of the two measurement techniques to this kind of flow. Repeatability of data and correlation allow to conclude that uncertainty of both measurement techniques remains within calibration limits, even in the harsh environment of a flame.
From a fluid-dynamic point of view, measurement results have shown that, by increasing the Reynolds number and the equivalence ratio, the flickering frequency shifts significantly when the flame is turbulent and dominated by the inertia forces, while it rests almost constant since the flame is diffusive and buoyant. Further tests, performed varying separately the Reynolds number and the equivalence ratio, will be necessary to better understand these phenomena.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors wish to thank Dr. M. Gasparetti for his precious contribution to the success of the experiments and also ENEA for offering partial financial support to the research here presented.

REFERENCES

Chiu and Summerfield, 1974, "Theory of Combustion Noise", Acta Astronautica, vol. 1.

Durao, D.F.G., Fernandes, E.C., Heitor, M.V., 1996, "Velocity, Pressure and Heat Release Characteristics of a Premixed Pulsed Flame", *Proc. 8th Int. Symp. on Application of Laser Technique to Fluid Mechanics*, Lisbon, Portugal.

Lewis, G. S., Cantwell, B. J., Vandsburger, U. and Bowman, C. T., 1988, "An Investigation of the Structure of a Laminar Non-premixed Flame in an Unsteady Vortical Flow", *The Twenty--Second International Symposium on Combustion*, The University of Washington, Seattle, Washington.

Lewis, G. S., Cantwell, B. J., 1989, "An experimental investigation of low-speed non-premixed flames and buoyant jets using particle tracking", Ph. D. Thesis, Report TF-47, Department of Mechanical Engineering, Stanford University, California.

Lecuona, A., Rodriguez, P. and Lasheras, J. C., 1992, "Three-dimensional Structure of Strongly Forced Jet Diffusion Flames: Flow Visualization Studies", *Combusting Flow Diagnostic*, NATO ASI Series.

Mungal M.G., Lourenco L.M., Krothapalli A., 1994, "Instantaneous Velocity Measurements in Laminar and Turbulent Premixed Flames Using On-Line PIV", *Proc. 7th Int. Symp. on Application of Laser Technique to Fluid Mechanics*, Lisbon, Portugal.

Narasimhan, 1986, "Predict Flare Noise", Hydrocarbon Processing.

Paone, N., 1994, "Velocity Measurements in Turbulent Premixed Flames: Development of a PIV Measurement system and Comparison with LDV", *Proc. 7th Int. Symp. on Application of Laser Technique to Fluid Mechanics*, Lisbon, Portugal.

Paone, N., Revel, G. M., Nino, E., 1996, "Velocity Measurements in High Turbulent Premixed Flames by a PIV Measurement system", *Proc. 8th Int. Symp. on Application of Laser Technique to Fluid Mechanics*, Lisbon, Portugal.

Poinsot, T. J., Trouve, A. C., Veyante, D. P., Candel, M. S., Esposito, J. E., 1987, "Vortex-driven Acoustically Coupled Combustion Instabilities", *J.of Fluid Mechanics*, vol. 177.

Schadow, 1994, "Combustion Control", Seminary at the University of Rome "La Sapienza".

Shivashankara, Strhale, Handley, 1975, "Evaluation of Combustion Noise Scaling Laws by an Optical Technique", *AIAA Journal* (May).

Strhale, 1972, "Some Results in Combustion Generated Noise", *J.of Sound and Vibration*, vol. 23.

Strawa, A. W. and Cantwell, B. J., 1989, "Investigation of an Excited Jet Diffusion Flame at Elevated Pressure", *J.of Fluid Mechanics*, vol. 200.

Zangl, P., Hermann, J., Orthmann, A., Vortmeyer, D., 1996, "Measurement of the Periodic Flow Instability during a Self Excited Combustion Oscillation by LDV ", *Proc. 8th Int. Symp. on Application of Laser Technique to Fluid Mechanics*, Lisbon, Portugal.

ABCM

BURNING RATE AND TURBULENT BURNING VELOCITY OF PREMIXED TURBULENT FLAMES IN STAGNATION FLOWS

E. Bourguignon, Y. Michou and I. Gökalp
Laboratoire de Combustion et Systèmes Réactifs
Centre National de la Recherche Scientifique
45071 Orléans cedex 2, France

SUMMARY

A new method to measure the burning rate of planar premixed turbulent flames in stagnation flows has been explored. The method is based on the balance of conditional mass fluxes in a control volume that extends from pure reactants to the stagnation plane. The difference between the mass of reactants flowing into and out of the control volume is the mass that has reacted within the control volume. Mean reaction rates and turbulent burning velocities can be deduced from the measurements of both conditional reactant velocities and reaction progress variable. The method has been applied in premixed turbulent flames in opposed jets configuration. The present investigation has demonstrated that the determination of the turbulent burning velocity defined by the axial cold boundary velocity lead to an overestimation of the burning rate in premixed flame.

INTRODUCTION

The determination of the turbulent flame speed and the mean reaction rate in premixed turbulent combustion is a fundamental problem for many energy systems. Many configurations and methodologies have been adopted to caracterize them. A few years ago, Cho et al. (1986) introduced the use of the turbulent stagnation flow configuration for fundamental studies of premixed turbulent flames. They demonstrated that, because of its planar configuration, the stagnation flame is useful to determine the propagation speed of turbulent premixed flames. Following previous studies by Wu et Law (1984) and Law et al. (1986) for laminar flames in this configuration, the turbulent burning velocity defined as the mean axial velocity at the upstream boundary of the turbulent flame brush. However, recent work by Shepherd and Kostiuk (1994) showed that the flow speed at the leading edge of a flame stabilized in a divergent flow cannot be used to determine the mean burning rate. In a more recent paper, Kostiuk and Shepherd (1996) have detailed the way to obain the turbulent flame speed based on the determination of the mean burning rate accross a flame brush. This technique is applied here to flames stabilized in opposed turbulent flows. The present paper describes the results of an initial parametric study.

EXPERIMENTAL SET-UP

Figure 1 shows the experimental set-up. Two geometrically identical burners (30 mm diameter) are mounted on a computer controlled two-axe traverse system. The upper one is water-cooled. The burners are supplied with identical premixed methane/air mixtures. The nozzles are placed such that the generated opposed jet flowfield produces an axisymmetric free stagnation plane. The jets are surrounded by a co-flow of air (exit section 50 mm) that homogenizes the turbulence and reduces the buoyancy of the flames (Mounaïm and Gökalp, 1993). Thus, a uniform velocity profile for large radial distances is preserved.

The optic diagnostic system provides one point information on both the dynamic and scalar fields. The flow velocities are measured by using a 2 color (green 514.5 nm and blue 488 nm), 2 component laser Doppler velocimeter. A 2 Watt beam from an argon-ion laser is focused in an optical fibre. The cyan color beam is separated into two beams; one cyan beam is then re-separated into a blue and a green beam The beams are frequency shifted by a Bragg cell and a differential frequency of 5 Mhz is used for both components for removal of directional ambiguity.

Doppler bursts are collected by two photo-multipliers assembled with a color separator on an optical lens system placed in the forward scattering direction at approximately 15° from the optical axis. The signals are analyzed by a TSI processor IFA 755 to determine the local flow velocity. The signals from the LDA processor are filtered (low pass filter 10 Mhz, high pass filter 1 Mhz) and amplified before computer storage for post-processing. The data are analysed to obtain the mean and rms fluctuations of the two conditional reactant velocity components. At each measurement position, 10240 pairs of validated velocity data points are stored. Seeding is provided by olive oil droplets with mean size less than 1 μm introduced into the flow by an atomizer. The disappearance of the droplets at the flame front provides an indicator function for the presence of reactants or products from which the reaction progress variable $\overline{c}$ may be readily determined.

The reaction progress variable $\overline{c}$ is obtained by collecting the Mie scattering intensity with another photomultiplier and lens assembly with a 514.5 nm interferential band pass filter placed also in the forward scattering direction at approximately 15° from the optical axis. The intensity of the signal from the multiplier is converted into voltage with a 20 kΩ resistor. The data acquisition system DAS-50 collects 10° points at a sampling rate of 375 kHz. The shape of the signal is insensitive to a sample rate above 100 kHz. The Mie scattering signal (figure 2) resembles a random telegraph signal with a sharp transition between signal levels representing the reactants and the products. The products and the reactants are perfectly distinct. Consequently, the local value of $\overline{c}$ can be easily determined by specifying a threshold criterion near the mid range intensity and then by evaluating the percentage of time spent in the products. The local value of the progress variable is then:

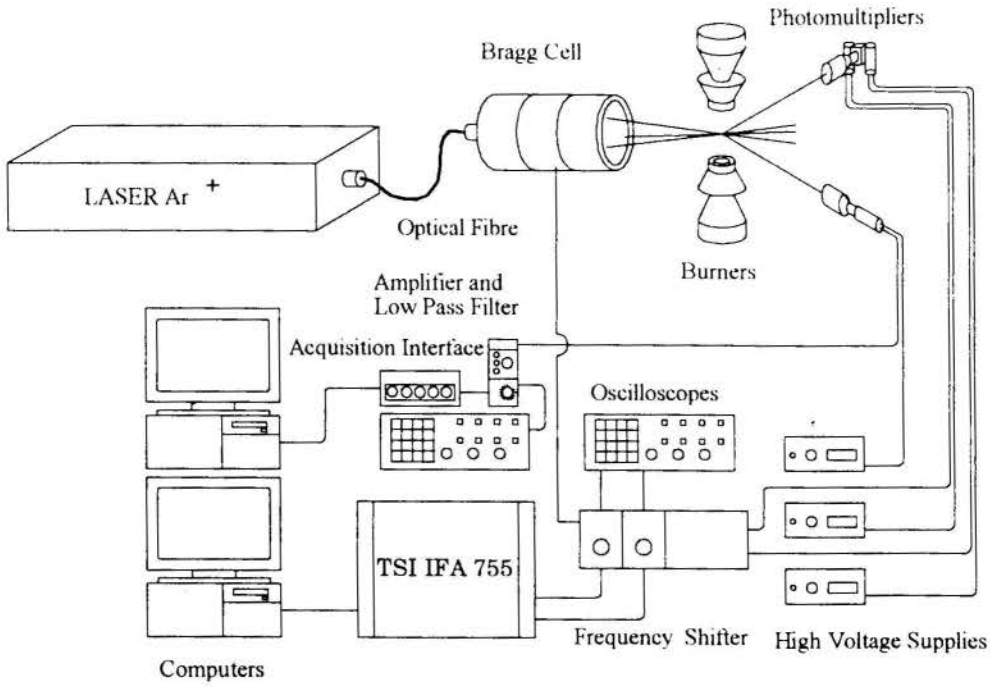


Figure 1 - Schematic of the experimental set-up

$$\bar{c} = \frac{\bar{t}_p}{\bar{t}_r + \bar{t}_p} \qquad (1)$$

where $\bar{t}_r$ and $\bar{t}_p$ are the mean passage times, of reactants and products, respectively.

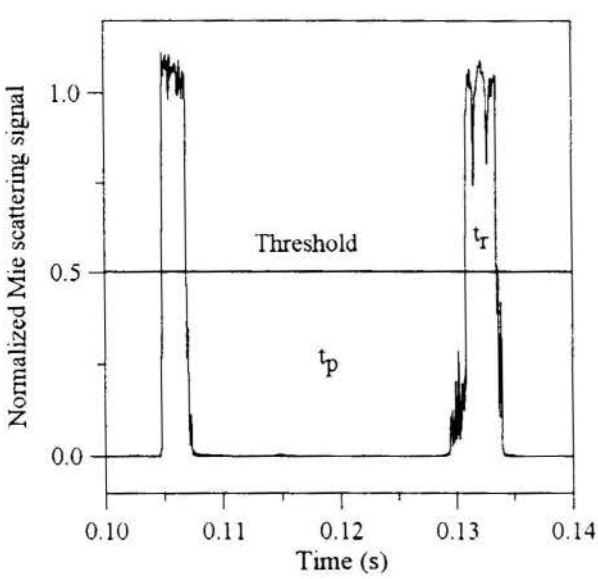


Figure 2 - Mie scattering signal and crossing times t_r and t_p

METHODOLOGY

The method described by Kostiuk and Shepherd (1996) to estimate the burning rate of a flame is adapted here to flames stabilized in turbulent opposed jet flows. Consider the control volume shown in figure 3 which extends from pure reactants ($\bar{c} \approx 0$) to the stagnation plane ($\bar{c} \approx 1$) with a diameter D.

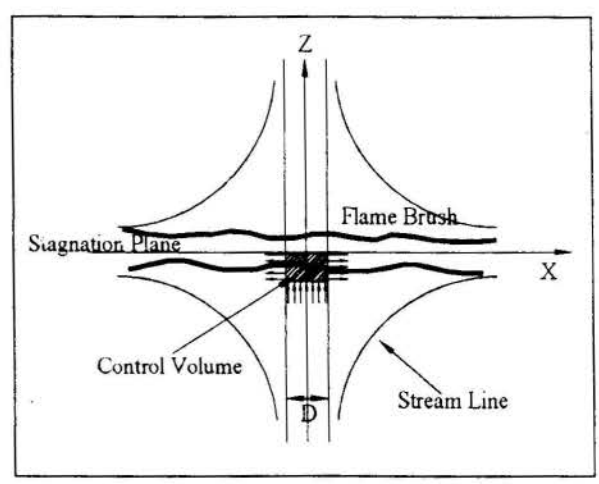


Figure 3 - Schematic of the control volume

The mass burned within the control volume is the difference between the mass flow of reactants into and out of the control volume. The mean burning rate is then given by

$$\int \bar{w} dz = \frac{\bar{\dot{M}}_{in} - \bar{\dot{M}}_{out}}{\pi D^2 / 4} \qquad (2)$$

The mass flow of reactants into the control volume is:

$$\bar{\dot{M}}_{in} = \frac{\pi D^2}{4} \rho_r \bar{U}_{\bar{c}=0} \qquad (3)$$

and the expression for the mass flow of reactants out of the control volume is:

$$\overline{M}_{out} = \frac{\pi D \rho_r}{2} \int_{Z\overline{c}=0}^{Z\overline{c}=1} \overline{V}_{r=\pm D/2}(1-\overline{c})\mathrm{d}z \qquad (4)$$

Where $\overline{U}$ and $\overline{V}$ are the mean axial and radial velocities of the reactants respectively. ρ_r is the reactant density. The term $(1-\overline{c})$ represents the fraction of time the reactants spend in a given point of space. Dividing this burning rate by the reactants density leads to the mean turbulent burning velocity S_T

$$S_T = \frac{1}{\rho_r}\int \overline{w}\mathrm{d}z \qquad (5)$$

This mean turbulent burning velocity is different from the local flame propagation speed of a flame front relative to a turbulent flow. This speed measures the overall consumption rate of the turbulent flame brush.

EXPERIMENTAL RESULTS

The burning rate and the turbulent burning velocity are determined for various diameters D of the control volume. Measurements of the radial velocities and the progress variable are performed along traverses 8,10 and 12 mm from the stagnation

Experimental measurements were made with a premixed methane/air mixture of equivalence ratio 1.0 and with an exit velocity of 5 m/s. The bulk strain rate defined by the velocity gradient at the upstream edge of the flame front is 225 s^{-1}.

For this set of experiments, the flow conditions are chosen far from extinction. The two flames are well-separated and the mean progress variable $\overline{c}$ from the Mie scattering signal is equal to 1 in the region between the two flames.

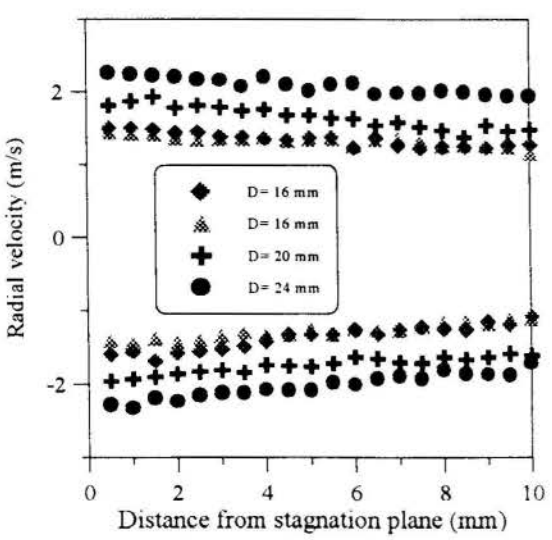


Figure 4 - Radial velocity ot the reactants in the flame brush for different control volume diameters

Figure 4 represents the behaviour of the radial velocity in the flame brush for different control volume diameters. The radial velocity is only slightly modified by the flame brush. The reactant flux out of the control volume is then obtained by weighting the radial velocity with the function $(1-\overline{c})$. An example of the variation with axial distance, for each side of the

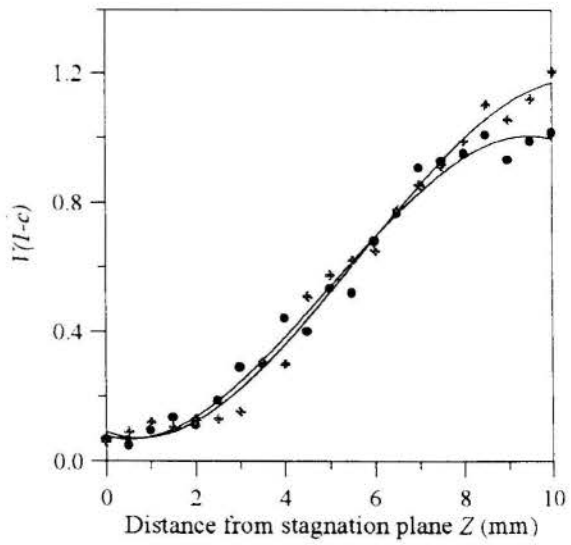


Figure 5 - Variation of the radial reactant flux with axial distance

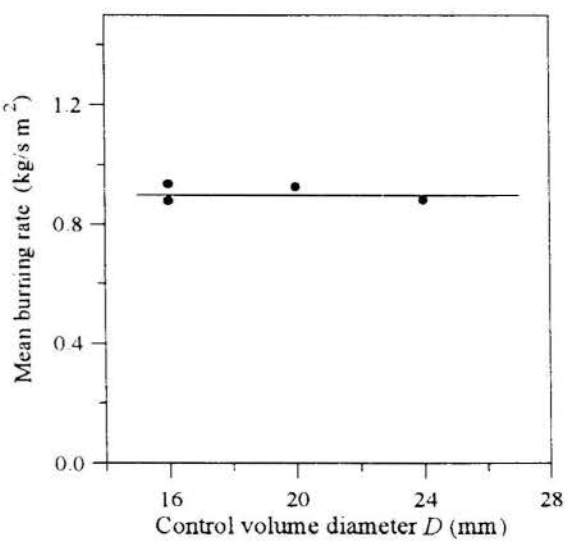


Figure 6 - Burning rate for each control volume diameter

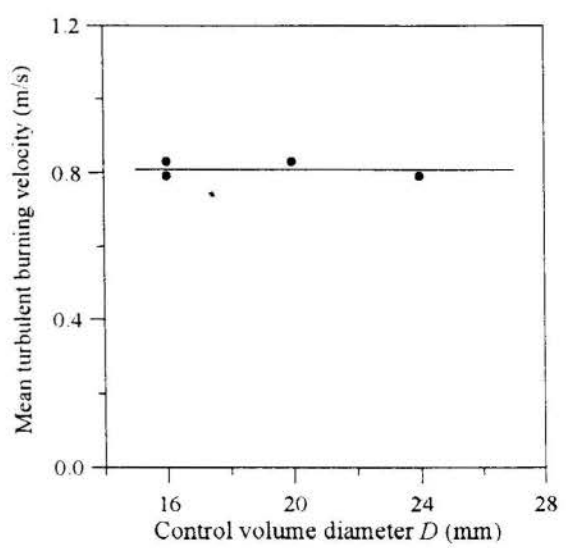


Figure 7 - Turbulent velocity for each control volume diameter

control volume around the symmetry axis, of the integrand on the right hand side of the equation for the mass flow of reactants out of the control volume, $\overline{M}_{out}$, is shown in figure 5.

The mass flow rate of reactants leaving the control volume is then subtracted from the axial mass flow rate of reactants at the cold boundary of the flame, $\overline{M}_{in}$. The difference between the two fluxes gives the mass flow rate of reactants consumed in the control volume. Figure 6 shows the burning rate determined for each control volume diameters.

Dividing the burning rate by the unburned gas density, the mean turbulent burning velocity can be deduced (figure 7). The mean turbulent burning velocity is found to be independent of the size of the experimental control volume. Consequently, the flame is uniform near the stagnation streamline.

DISCUSSION

The mean turbulent burning velocity shown in figure 10 as determined by the present method can be compared to the classical definition used for flames in a stagnation point flow: the mean velocity at the cold boundary of the flame front. In the case of the opposed jet configuration, the mean axial velocity profile does not present a well-determined velocity minimum like for flames stabilized by a stagnation plate. Consequently, we here choose the mean axial velocity at the cold boundary of the flame front. This boundary is defined as the position where the progress variable is $\overline{c} = 0.05$, indicating the beginning of the flame brush. This definition gives us a mean turbulent propagation speed of 2.2 m/s. This latter value is 2.7 times larger than the value deduced from the mean reaction rate.

Therefore, the mean turbulent burning velocity, as determined here is different from the mean displacement velocity of the flame brush.

Consequently, the mean reaction rate determined by the classical method is overestimated compared to our direct measurements of consumed reactants. Indeed, as shown in figure 8, in divergent flows, a large part (about 65%) of reactants entering at the leading edge of the flame leaves the control volume without burning. The mean reaction rate estimated as the velocity at the leading edge of the flame brush do not take into account this fraction of reactants leaving the control volume without burning.

The normalization by the unstretched laminar burning velocity (S_{L0}=0.43 m/s) gives S_T/S_{L0}=1.9 instead of S_T/S_{L0}=5.1 with the classical definition. The turbulence intensity was u'=0.8 m/s, i.e. u'/S_{L0}= 1.9. For comparison, the results of Cho et al. (1986) for turbulent methane/air flames stabilized by a stagnation plate give for u'/S_{L0}= 1.9 a set of experiments with a ratio S_T/S_{L0} between 3.5 and 4.

Some uncertainities in this comparison are due to the normalization of S_T with the unstretched laminar burning velocity. Normalization with the stretched laminar burning velocity would be helpful but there is still no consensus on the determination of the stretched laminar burning velocity(Tien and Matalon, 1991). Therefore, we do not know exactly to what extend the variation of S_T is caused by changes in the stretched laminar burning velocity S_L.

CONCLUSION

A measurement technique is used for turbulent premixed flames in the opposed jet configuration to measure the mean burning rate. The technique is based on the difference between the reactants mass flow in and out of a control volume.

The conditional reactants velocities are measured with a two-component Laser Doppler Velocimetry system in a flow seeded with oil. Simultaneous Mie scattering from L.D.V probe volume is used to measure the mean progress variable. The combination of velocity and progress variable allows the determination of the mean reactants flux.

The present investigation shows that the classical determination of the turbulent burning velocity defined as the axial cold boundary velocity leads to an overestimation of the mean burning rate because it does not take into account the radial flux of reactants

To complement this study, it would be useful to conduct a set of experiments on stretched laminar flames in the opposed jet or stagnation plate configuration in order to determine the mean burning rate of stretched laminar flames by the present method. In this case, the normalization of S_T by the stretched laminar burning velocity S_L would take into account the effect of the bulk strain rate.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work is supported by the French Army Research Office, DRET, group 7, the Conseil Regional du Centre and the CNRS. The authors would like to thank Dr. L.W. Kostiuk for its helpful advices.

REFERENCES

Cho, P., Law, C.K., Hertzberg, J.R. and Cheng, R.K. 1986, "Structure and Propagation of Turbulent Premixed Flames Stabilized in a Stagnation Flow", *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp 1493-1499.

Kostiuk, L.W. and Shepherd, I.G. 1996, "Measuring The Burning Rate of Premixed Turbulent Flames in Stagnation Flows", *Combust. Sci. and Tech.*, Accepted.

Law, C.K., Zhu, D.L. and Yu, G. 1986, "Propagation and Extinction of Stretched Premixed Flames", *Twenty-First Symposium (Int.) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp 1419-1426.

Mounaïm-Rousselle, C., 1993, Combustion Turbulente Prémélangée dans un Ecoulement à Jets Opposés, Ph. D. thesis, University of Orléans, France.

Shepherd, I.G. and Kostiuk, L.W. 1994, "The Burning Rate of Premixed Turbulent Flame in Diverging Flows", *Combust. Flame*, vol 96, pp 371-380.

Tien, J.H. and Matalon, M., 1991, "On the Burning Velocity of Stretched Flames", *Combust. Flame*, Vol 84, pp 238-248.

Wu, C.K. and Law C.K. 1984, "On the Determination of Laminar Flame Speeds from Stretched Flames", *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp 1941-1949.

ítos da Variação de Densidade em Chamas Difusivas Transie

F. S. COSTA
Laboratório Associado de Combustão e Propulsão
INPE - Cachoeira Paulista, SP, 12630-000 - Brasil
M. SICHEL
Department of Aerospace Engineering
The University of Michigan, Ann Arbor, MI 48109 - USA

RESUMO

Os efeitos da variação de densidade causados pela exotermicidade da reação são analisados para o caso de chamas difusivas transientes. São obtidas soluções analíticas e numéricas para chamas difusivas unidimensionais considerando-se reações de passo simples, chama infinitesimal, pressão constante, ignição instantânea e Le=1. É obtida uma equação integro-diferencial dependendo da razão de equivalência inicial, um novo parâmetro para chamas difusivas, e do grau de exotermicidade da reação. São obtidas expressões analíticas para a posição e a velocidade de propagação da chama, campo induzido de velocidades, perfis de temperatura, perfis de concentração e taxas de consumo mássico de combustível. Mostra-se que o campo induzido de velocidades decai rapidamente após a ignição.

INTRODUÇÃO

Muitos problemas que envolvem escoamentos reativos podem ser analisados considerando-se elementos de chama modelados como chamas transientes unidimensionais. Estas chamas transientes elementares são um modelo de flamículas, ou *flamelets*, que surgem em meios turbulentos reativos onde a espessura da zona de reação é menor que a escala espacial de turbulência.

Na camada cisalhante formada entre dois escoamentos paralelos de combustível e oxidante ocorre a formação de vórtices que interagem com a chama difusiva formada na interface dos fluidos. Durante a interação de um vórtice com uma chama são geradas estruturas na forma de cristas de onda ao redor do núcleo do vórtice as quais podem ser analisadas localmente como chamas planas transientes, conforme mostrado por Marble (1983). Inclusões ou bolsões de combustível ocorrem em processos de queima turbulenta e também em queima de plumas pulsadas. Estas inclusões podem ser modeladas como chamas transientes unidimensionais, normalmente aproximadas como esferas de gás.

A análise da queima de gotas em pressões supercríticas pode ser considerada equivalente à queima de inclusões gasosas de combustível, uma vez que não há uma fase líquida bem definida acima da pressão crítica, conforme mostrado por Spalding (1958) e Rosner (1967). A queima de gotas de combustível em diversos dispositivos como turbinas, câmaras de foguetes e motores diesel é, muitas vezes, realizada em pressões supercríticas.

Há disponíveis na literatura diversas soluções relativas à queima transiente considerando-se processos com densidade constante e propriedades constantes tais como as difusividades de massa e de calor. Spalding (1958) ao analisar a queima supercrítica de gotas considerou o problema de uma fonte pontual de combustível, obtendo resultados como o tempo de queima e a taxa de consumo de combustível. A análise de Spalding foi estendida por Rosner (1967) que considerou uma fonte distribuída de combustível, ou uma inclusão gasosa esférica de combustível em um meio oxidante. Seu intuito foi o de estudar a liberação de substâncias químicas na alta atmosfera. Marble (1983) apresentou a análise das interações de vórtices viscosos com chamas difusivas, visando entender os elementos básicos da queima de chamas turbulentas. O problema de Marble foi estendido por Shiah (1992) para o caso de um *spray* denso interagindo com um vórtice potencial. Fendell et al. (1994) apresentaram resultados analíticos referentes à queima difusiva de inclusões de gás esféricas e semi-esféricas.

A maioria dos autores ao estudar a queima de chamas difusivas não analisa os efeitos da variação de densidade devidos à exotermicidade da reação. Foi mostrado por Klajn e Oppenhein (1982) que a exotermicidade pode aumentar significativamente a espessura de jatos planos reativos, embora não afete o seu comprimento, enquanto que os jatos reativos axisimétricos apresentam modificações tanto em diâmetro quanto em comprimento. Os resultados obtidos foram expressos em forma algébrica, sendo derivados a partir de soluções autosimilares no domínio incompressível transformado. Karagozian e Marble (1986) estudaram os efeitos da exotermicidade em interações entre chamas e vórtices, mostrando que não havia um efeito significativo na taxa de consumo de combustível, muito embora houvesse uma expansão da estrutura do vórtice com a chama. Os efeitos da taxa de reação finita sobre estas interações foram analisados por Rhem et al. (1993) considerando também chamas com densidade variável. Costa (1995) estudou numericamente a queima de chamas difusivas transientes com química detalhada, e considerou propriedades variáveis.

Neste trabalho é feita uma análise detalhada dos efeitos da variação de densidade causados pela exotermicidade da reação sobre a queima de chamas difusivas uni-dimensionais transientes. Mostra-se que chamas planas comportam-se diferentemente de chamas curvas no tocante à máxima expansão, tempo de queima e taxa de consumo de combustível, quando comparadas com chamas de densidade constante. O tempo de queima e a taxa de consumo de combustível não são afetados pela variação da densidade no caso de chamas planas, enquanto que chamas esféricas ou cilíndricas podem apresentar uma significativa redução no tempo de queima e aumento na taxa de consumo de combustível. O aumento na expansão da chama é maior no

caso de chamas planas do que para chamas curvas, como se mostra a seguir.

FORMULAÇÃO TEÓRICA

O presente modelo teórico considera a queima difusiva unidimensional com coeficientes de difusão iguais para todas as espécies, microgravidade, nenhum efeito de radiação, nenhuma convecção, nenhuma difusão térmica, pressão constante, número de Mach pequeno, número de Lewis unitário (Le = 1 ou $\lambda/C_p = \rho D$). Considera-se que a reação química seja de passo simples, com s Kg de oxidante reagindo com 1 Kg de combustível, isto é, $1F + sO \rightarrow (1+s)P$. Em conseqüência, as equações de conservação da massa, das espécies e da energia são dadas, respectivamente por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^j}\frac{\partial(\rho r^j \mathrm{v})}{\partial r} = 0 \qquad (1)$$

$$\rho\left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathrm{v}\frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) = \frac{1}{r^j}\frac{\partial}{\partial r}\left(\rho D r^j \frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) + w_i \qquad (2)$$

$$\rho\left(\frac{\partial h}{\partial t} + \mathrm{v}\frac{\partial h}{\partial r}\right) = \frac{1}{r^j}\frac{\partial}{\partial r}\left(\rho D r^j \frac{\partial h}{\partial r}\right) + w_F \Delta h_r \qquad (3)$$

onde ρ é a densidade total, v é a velocidade do fluido, t é o tempo, r a posição, Y_i é fração em massa da espécie i, Δh_r é o calor de reação e j = 0,1,2 para geometrias cartesiana, cilíndrica e esférica, respectivamente. A fig.1 mostra uma vista esquemática das chamas unidimensionais sob consideração, com dimensões iniciais características $2a$ e frações de massa iniciais de combustível e oxidante $Y_{F,0}$ e $Y_{O,0}$, respectivamente.

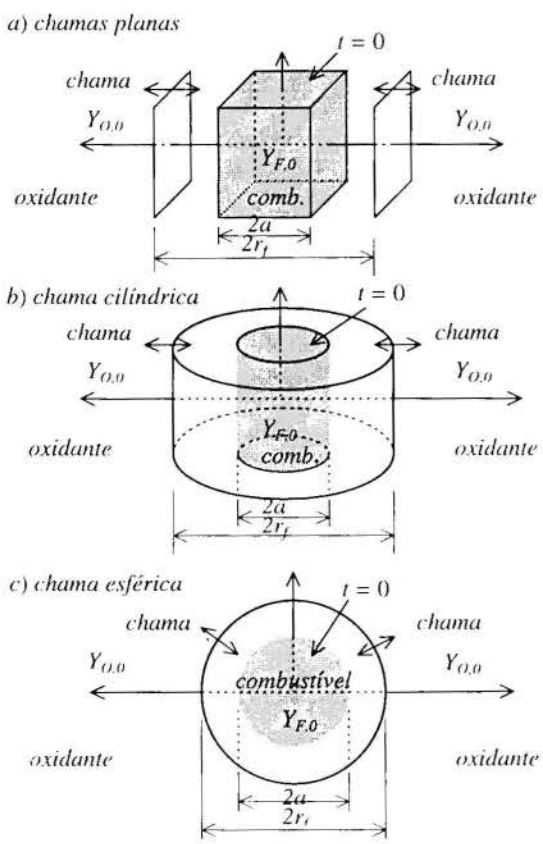


Figura 1 - Esquema das chamas transientes unidimensionais.

A fim de eliminar os termos de reação nas equações (2) e (3) são definidas as seguintes variáveis $\beta_i (i=F,O,P,T)$, ou variáveis de Schvab-Zeldovich normalizadas, de acordo com Williams (1985):

$$\beta_i = \frac{1+\phi\dfrac{Y_F}{Y_{F,0}} - \dfrac{Y_O}{Y_{O,0}}}{1+\phi} = 1 - \frac{\phi}{1+s}\frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} =$$

$$= 1 - \frac{Y_0}{Y_{O,0}} - \phi\frac{C_p(T-T_0)}{Y_{F,0}Q} = \frac{Y_F}{Y_{F,0}} + \frac{C_p(T-T_0)}{Y_{F,0}Q}, \qquad (4)$$

onde $\phi = sY_{F,0}/Y_{O,0}$ é definido como uma razão de equivalência inicial ou razão F/O entre combustível e oxidante para uma chama difusiva e $Q = -\Delta h_r$ é o calor liberado. Deve-se notar que os conceitos de razão de equivalência inicial e de razão F/O são normalmente associados a chamas pré-misturadas. A posição da chama, considerando-se química rápida e uma chama de espessura infinitesimal, é dada por $\beta_i = 1/(1+\phi) = \beta_f$, após fazer $Y_F = Y_O = 0$ nas definições de β_i acima.

Combinando-se as equações (2) e (3), obtem-se a seguinte equação convectivo-difusiva para β_i:

$$\rho\left(\frac{\partial \beta_i}{\partial t} + \mathrm{v}\frac{\partial \beta_i}{\partial r}\right) = \frac{1}{r^j}\frac{\partial}{\partial r}\left(\rho D r^j \frac{\partial \beta_i}{\partial r}\right), \qquad (5)$$

tendo condições iniciais e de contorno

$$\beta_i(|r| < a, t = 0) = 1 \qquad (6a)$$

$$\beta_i(|r| > a, t = 0) = 0 \qquad (6b)$$

$$\beta_i(|r| \rightarrow \infty, \forall t) = 0. \qquad (6c)$$

As variáveis β_i correspondem à fração de mistura, visto que são normalizadas e a Eq. (5) não possui o termo fonte. Admite-se que a ignição ocorra instantaneamente em todos os pontos da interface combustível-oxidante. Fendell et al.(1994) mostraram que a solução para o problema de Burke-Schumann transiente descreve o lugar geométrico dos pontos em que o combustível e o oxidante mantêm concentrações estequiométricas, ao longo do tempo, enquanto não ocorrer a ignição. Por outro lado, a ignição vai ocorrer provavelmente ao longo deste *locus*, como foi demonstrado por Linãn e Crespo (1976). Considerando-se um consumo rápido na região de mistura dos reagentes, a evolução da chama após a ignição vai proceder de acordo com a solução clássica de Burke-Schumann, sempre que o tempo característico de reação for mantido menor que o tempo característico de difusão durante o processo de queima.

Para eliminar os termos convectivos nas equações do problema, adota-se uma forma generalizada da transformação de Howarth-Dorodnitsyn, introduzindo-se duas novas variáveis, $\tilde{\tau}$ e $\tilde{\eta}$:

$$\tilde{\tau} = t \quad \text{e} \quad \tilde{\eta} = (1+j)\int_0^r \left(\frac{r}{a}\right)^j \frac{\rho}{\rho_0} dr \qquad (7)$$

Quando t=0 então $\rho = \rho_0$ e $\tilde{\eta} = a$ para r=a, e $\tilde{\eta} = 0$ para r=0. Com estas novas variáveis, as Eqs. (1) e (5) ficam:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tilde{t}} + (1+j)\frac{\rho^2}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial \tilde{\eta}}\left(\tilde{\mathrm{v}}\left(\frac{r}{a}\right)^j\right) = 0 \qquad (8)$$

$$\frac{\partial \beta_i}{\partial \tilde{t}} = (1+j)^2 D_0 \frac{\partial}{\partial \tilde{\eta}}\left(\left(\frac{r}{a}\right)^{2j}\frac{\partial \beta_i}{\partial \tilde{\eta}}\right) \qquad (9)$$

Para se obter a Eq. (9), adotou-se o modelo de gás de Chapman, isto é, admitiu-se que $\rho^2 D$=constante, uma vez que $D \sim T$, com $1.75<c<2.0$, e $\rho \sim T^{-1}$, para um processo isobárico. D_0 é o coeficiente de difusão na temperatura inicial T_0 e $\tilde{v}(\tilde{\eta},\tilde{\tau}) \equiv v(r,t)$ é a velocidade do fluido no espaço transformado. Em termos das variáveis adimensionais $\overline{\eta} = \tilde{\eta}/a$, $\eta = r/a$, $\overline{v} = \tilde{v}a/D_0$ e $\overline{\tau} = \tilde{\tau}D_0/a^2$, as eqs. (8) e (9) ficam:

$$\frac{\partial}{\partial \overline{\tau}}\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right) = \frac{\partial}{\partial \overline{\eta}}\left((1+j)\overline{v}\eta^j\right) \tag{10}$$

$$\frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\tau}} = (1+j)^2 \frac{\partial}{\partial \overline{\eta}}\left(\eta^{2j}\frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\eta}}\right) \tag{11}$$

onde a posição adimensional no espaço, η, está relacionada à posição adimensional no espaço transformado, $\overline{\eta}$, por

$$\eta = \left(\int_0^{\overline{\eta}} \frac{\rho_0}{\rho} d\overline{\eta}\right)^{1/(1+j)} \tag{12}$$

Esta pode ser simplificada para o caso em que os reagentes encontram-se diluídos ou quando reagentes e produtos possuem pesos moleculares iguais, obtendo-se

$$\eta = \left(\int_0^{\overline{\eta}} \frac{T}{T_0} d\overline{\eta}\right)^{1/(1+j)} \tag{13}$$

Obtem-se a razão de temperaturas usando-se as definições das variáveis de Schvab-Zel'dovich, supondo que não haja interpenetração dos reagentes na chama:

$$\frac{T}{T_0} = 1 + \frac{k}{\phi}(1-\beta_i) \qquad |\overline{\eta}| < |\overline{\eta}_f| \tag{14a}$$

$$\frac{T}{T_0} = 1 + k\beta_i \qquad |\overline{\eta}| > |\overline{\eta}_f|. \tag{14b}$$

Nestas expressões acima $|\overline{\eta}_f|$ é o valor absoluto da posição da chama no espaço transformado e $k = QY_{F,0}/C_p/T_0$ é o fator de exotermicidade ou calor adimensional de reação.

EQUAÇÃO DA DIFUSÃO PARA A FRAÇÃO DE MISTURA

Substituindo-se as expressões das razões de temperatura, dadas pelas equações (14a,b), na equação da evolução da fração de mistura, Eq. (11), resulta

$$\frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\tau}} = \frac{\partial}{\partial \overline{\eta}}\left(\alpha(\overline{\eta},\overline{\tau},\beta_i)\frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\eta}}\right), \tag{15}$$

onde $\alpha(\eta,\tau,\beta_i)$ é um coeficiente de difusão não linear, dado por

$$\alpha(\eta,\tau,\beta_i) = (1+j)^2\left[(1+k/\phi)\overline{\eta} - \frac{k}{\phi}\int_0^{\overline{\eta}} \beta_i d\overline{\eta}\right]^{\frac{2j}{1+j}}, \quad |\overline{\eta}| < |\overline{\eta}_f| \tag{16}$$

$$\alpha(\eta,\tau,\beta_i) = (1+j)^2\left[\eta_f^{1+j} + \overline{\eta} - \overline{\eta}_f + k\int_{\overline{\eta}_f}^{\overline{\eta}} \beta_i d\overline{\eta}\right]^{\frac{2j}{1+j}}, \quad |\overline{\eta}| > |\overline{\eta}_f| \tag{17}$$

com as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$\beta_i\left(|\overline{\eta}| < 1, \overline{\tau} = 0\right) = 1 \tag{18a}$$

$$\beta_i\left(|\overline{\eta}| > 1, \overline{\tau} = 0\right) = 0 \tag{18b}$$

$$\beta_i\left(|\overline{\eta}| \to \infty, \forall \overline{\tau}\right) = 0 \tag{18c}$$

$$\frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\eta}}\left(|\overline{\eta}| = 0, \overline{\tau} > 0\right) = 0 \tag{18d}$$

A posição da chama, $\overline{\eta}_f$, localiza-se onde $\beta_i = 1/(1+\phi) = \beta_f$. No caso de coordenadas Cartesianas, j=0, as equações íntegro-diferenciais não lineares acima tornam-se simples equações diferenciais lineares, idênticas às equações para o problema equivalente considerando-se densidade constante. Para chamas planas o espaço transformado mantém a mesma métrica que o espaço físico do problema equivalente com densidade constante, com elementos diferenciais tendo o mesmo comprimento nos dois sistemas.

Soluções analíticas para os problemas com densidade constante são apresentadas no Apêndice. A solução para a queima difusiva de chamas planas numa faixa de combustível com densidade constante, dada pela Eq. (A.2), é válida no espaço transformado, e todas as características da chama tendo densidade variável podem ser obtidas em forma analítica, invertendo-se as variáveis de Howarth, usando-se as Eqs. (12) ou (13). Para chamas cilíndricas ou esféricas, as Eqs. (15) a (18) devem ser integradas numericamente.

VELOCIDADE INDUZIDA DO FLUIDO

A Eq. (10) pode ser integrada com relação a $\overline{\eta}$, para t fixo, fornecendo uma equação para o campo induzido de velocidades, $\overline{v}$:

$$\overline{v} = \frac{1}{(1+j)\eta^j}\int_0^{\overline{\eta}} \frac{\partial}{\partial \overline{\tau}}\left(\frac{\rho_0}{\rho}\right) d\overline{\eta} + \frac{F(\overline{\tau})}{(1+j)\eta^j} \tag{19}$$

Na expressão acima $F(\overline{\tau})$ é uma função arbitrária do tempo. Como a velocidade do fluido é zero na origem e em pontos distantes da chama em todos os momentos, então $F(\overline{\tau})$ é identicamente zero, para qualquer instante de tempo. Uma expressão similar foi obtida por Ramos (1987) para o caso de chamas pré-misturadas. A Eq. (19) pode ser simplificada para reagentes diluídos ou para reagentes e produtos com pesos moleculares iguais, dando

$$\overline{v} = \frac{1}{(1+j)\eta^j}\int_0^{\overline{\eta}} \frac{\partial}{\partial \overline{\tau}}\left(\frac{T}{T_0}\right) d\overline{\eta} \tag{20}$$

Substituindo as Eqs. (14*a*,*b*) na Eq. (20) acima, fornece:

$$\overline{v} = -\frac{k}{\phi}\frac{1}{(1+j)\eta^j}\int_0^{\overline{\eta}} \frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\tau}} d\overline{\eta} \qquad |\overline{\eta}| < |\overline{\eta}_f| \tag{21a}$$

$$\overline{v} = \frac{1}{(1+j)\eta^j}\left(-\frac{k}{\phi}\int_0^{\overline{\eta}} \frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\tau}} d\overline{\eta} + k\int_{\overline{\eta}_f}^{\overline{\eta}} \frac{\partial \beta_i}{\partial \overline{\tau}} d\overline{\eta}\right) \qquad |\overline{\eta}| > |\overline{\eta}_f| \tag{21b}$$

As Eqs. (21a,b) podem ser facilmente calculadas para chamas planas, mas requerem integração numérica para chamas não planas.

POSIÇÃO E VELOCIDADE DA CHAMA

A posição da chama no problema com densidade variável é dada pela Eq. (12):

$$\eta_f = \left(\int_0^{\bar{\eta}_f} \frac{\rho_0}{\rho} d\bar{\eta} \right)^{1/(1+j)} \tag{22}$$

que pode ser simplificada para

$$\eta_f = \left(\int_0^{\bar{\eta}_f} \frac{T}{T_0} d\bar{\eta} \right)^{1/(1+j)} = \left[\bar{\eta}_f + \frac{k}{\phi} \int_0^{\bar{\eta}_f} (1-\beta_i) d\bar{\eta} \right]^{1/(1+j)} \tag{23}$$

A velocidade da chama, v_f, pode ser calculadada mediante diferenciação da Eq. (22) com relação ao tempo, dando

$$v_f = \frac{d\eta_f}{d\tau} = \frac{1}{(j+1)\eta_f^j} \left[\int_0^{\bar{\eta}_f} \frac{\partial}{\partial \bar{\tau}} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right) d\bar{\eta} + \frac{\rho_0}{\rho} \frac{d\bar{\eta}_f}{d\bar{\tau}} \right]. \tag{24}$$

Substituindo-se $\bar{v}$, dado pela Eq.(20) e calculado na posição da chama, na Eq. (24) acima, obtem-se

$$v_f = \bar{v}(\bar{\eta}_f, \bar{\tau}) + \frac{1}{(j+1)\eta_f^j} \frac{T_f}{T_0} \frac{d\bar{\eta}_f}{d\bar{\tau}}. \tag{25}$$

e a expressão acima indica que a velocidade da chama v_f depende da velocidade do fluido e da velocidade da chama no espaço transformado, $\bar{v}_f = d\bar{\eta}_f / d\bar{\tau}$. Em conseqüência, quando $\bar{v}_f = 0$, a velocidade da chama é igual à velocidade do escoamento, e a expansão máxima da chama no espaço transformado não corresponde à expansão máxima da chama no espaço físico.

TAXA DE CONSUMO DE COMBUSTÍVEL

A taxa de consumo de combustível por unidade de área da chama com densidade variável, $\dot{m}_{FVD}$, é dada por

$$\dot{m}_{FVD} = \rho D \frac{\partial Y_F}{\partial r}\bigg|_{r_f} = (1+j) \frac{\rho_0 D_0 Y_{F,0}}{a} \frac{1+\phi}{\phi} \eta_f^j \left| \frac{\partial \beta_i}{\partial \bar{\eta}} \right|_{\bar{\eta}=\bar{\eta}_f} \tag{26}$$

e, portanto, a razão entre as taxas de consumo com densidade variável, $\dot{m}_{FVD}$, e com densidade constante, $\dot{m}_{FCD}$, torna-se

$$\frac{\dot{m}_{FVD}}{\dot{m}_{FCD}} = (1+j)\eta_f^j \left| \frac{\partial \beta_i}{\partial \bar{\eta}} \right|_{\bar{\eta}=\bar{\eta}_f} \left| \frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta} \right|_{\eta=\eta_f}^{-1}. \tag{27}$$

Outro método de calcular o consumo de combustível é calculando a percentagem de combustível residual:

$$\frac{m_F}{m_{F,0}} = (1+j) \int_0^{\eta_f} \frac{\rho}{\rho_0} \frac{Y_F}{Y_{F,0}} \eta^j d\eta, \tag{28}$$

onde m_F é a massa residual de combustível and $m_{F,0}$ é a massa inicial do mesmo. A Eq. (28) pode ser reescrita como

$$\frac{m_F}{m_{F,0}} = \int_0^{\bar{\eta}_f} \frac{Y_F}{Y_{F,0}} d\bar{\eta} = \frac{1+\phi}{\phi} \int_0^{\bar{\eta}_f} (\beta_i - \beta_f) d\bar{\eta}. \tag{29}$$

SOLUÇÕES ANALÍTICAS PARA CHAMAS PLANAS

No case de chamas planas sobre uma faixa de combustível, o consumo, dado pela Eq. (26), e a percentagem residual, dada pelas Eqs. (28) ou (29), não são afetados pela variação de densidade produzida pela exotermicidade, visto que j=0, $\rho^2 D = \rho_0^2 D_0$ e $\beta_i \equiv \Phi_0(\bar{\eta}, \bar{\tau})$, que é a solução para o problema da faixa de combustível com densidade constante mostrada no Apêndice. Portanto, o consumo e a percentagem residual de combustível para o problema com densidade variável são dados por

$$\dot{m}_{F,strip} = \frac{\rho_0 D_0 Y_{F0}(1+\phi)}{2a\phi} \left| \Delta(\bar{\eta}_f, \bar{\tau}) \right|, \tag{30}$$

onde $\Delta(\bar{\eta}, \bar{\tau}) = \exp\left(-\frac{(1-\bar{\eta})^2}{4\bar{\tau}} \right) - \exp\left(-\frac{(1+\bar{\eta})^2}{4\bar{\tau}} \right)$, e

$$\frac{m_F}{m_{F,0}} = \frac{1+\phi}{\phi} \int_0^{\bar{\eta}_f} (\Phi_0 - \beta_f) d\bar{\eta}. \tag{31}$$

A posição da chama no espaço transformado, $\bar{\eta}_f$, obtida da Eq. (A.5), é dada por

$$\Phi_0(\bar{\eta}_f, \bar{\tau}) = 1/(1+\phi) = \beta_f. \tag{32}$$

Para uma faixa de combustível, a posição da chama no espaço físico, η_f, relaciona-se com $\bar{\eta}_f$ através de

$$\eta_f = \bar{\eta}_f - \frac{k}{\phi} \int_0^{\bar{\eta}_f} (1 - \Phi_0(\bar{\eta}, \bar{\tau})) d\bar{\eta} \tag{33}$$

Após avaliar a integral, obtem-se

$$\eta_f = \frac{k}{2\phi} \left[\Omega(\bar{\eta}_f, \bar{\tau}) + 2\bar{\eta}_f \left(1 + \frac{\phi}{k} \right) + 2\sqrt{\pi\bar{\tau}} \Delta(\bar{\eta}_f, \bar{\tau}) \right] \tag{34}$$

onde $\Omega(\bar{\eta}, \bar{\tau}) = (\bar{\eta} - 1)\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{\eta} - 1}{\sqrt{4\bar{\tau}}} \right) - (\bar{\eta} + 1)\mathrm{erf}\left(\frac{\bar{\eta} + 1}{\sqrt{4\bar{\tau}}} \right)$.

A Fig. 2 mostra os efeitos da variação de densidade sobre chamas difusivas transientes planas. Pode-se notar que a expansão da chama aumenta significantemente com a exotermicidade da reação, comparando com chamas tendo densidade constante, descritas pelas curvas no espaço transformado. A evolução da chama depende de $k = QY_{F,0}/C_p/T_0$ e de $\phi = sY_{F,0}/Y_{O,0}$. Valores altos de ϕ ou k produzem maior expansão da chama. Os tempos de queima são iguais para chamas com densidade variável e com densidade constante, uma vez que as taxas de consumo de combustível são iguais.

A velocidade da chama plana no espaço físico, v_f, relaciona-se com a velocidade do fluido, $\bar{v}$, e a velocidade da chama no espaço transformado, $\bar{v}_f$, usando-se a Eq. (25), mediante

$$v_f = \bar{v}(\bar{\eta}_f, \bar{\tau}) + \frac{T_f}{T_0} \bar{v}_f, \tag{35}$$

onde $\bar{v}_f$ é obtido da Eq. (A.7), dando

$$\bar{v}_f = \frac{(\bar{\eta}_f - 1)\exp\left(-(1-\bar{\eta}_f)^2/4\bar{\tau}\right) - (\bar{\eta}_f + 1)\exp\left(-(1+\bar{\eta}_f)^2/4\bar{\tau}\right)}{2\bar{\tau}\Delta(\bar{\eta}_f, \bar{\tau})} \tag{36}$$

e a velocidade do fluido, usando as Eqs.(21a,b), fica

$$\bar{v} = -\frac{k}{\phi}\int_0^{\bar{\eta}} \frac{\partial \Phi_0}{\partial \bar{\tau}} d\bar{\eta} = \frac{k\Delta(\bar{\eta},\bar{\tau})}{2\phi\sqrt{\pi\bar{\tau}}}, \quad |\bar{\eta}| < |\bar{\eta}_f| \tag{37a}$$

$$\bar{v} = \frac{k}{2\phi\sqrt{\pi\bar{\tau}}}\left(\frac{\phi-1}{\phi}\Delta(\bar{\eta}_f,\bar{\tau}) - \Delta(\bar{\eta},\bar{\tau})\right), \quad |\bar{\eta}| > |\bar{\eta}_f| \tag{38b}$$

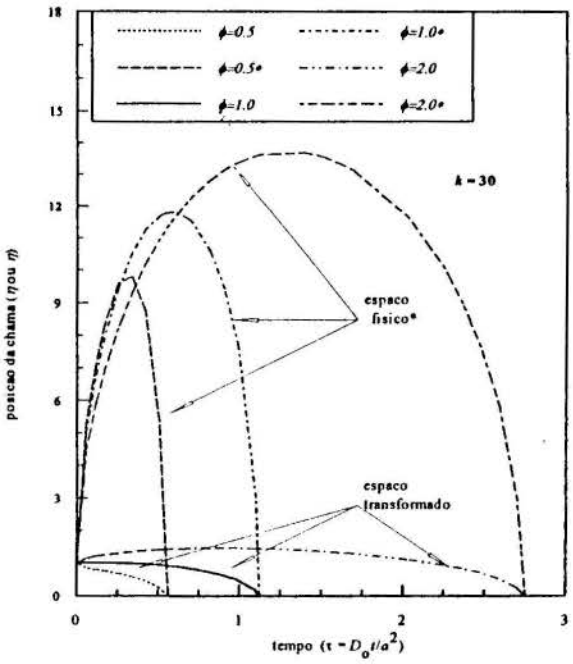


Figura 2 - Efeitos da exotermicidade sobre chamas planas.

A Fig. 3 mostra o campo induzido de velocidades no espaço transformado para chamas de difusão numa faixa de combustível tendo $\phi = 1$. Inicialmente, devido à descontinuidade nas condições iniciais, as duas chamas formadas induzem um campo de velocidades fortemente divergente o qual decai rapidamente após a ignição.

SOLUÇÕES NUMÉRICAS

Um esquema explícito de diferenças finitas (*FTCS*), com incrementos de tempo variáveis foi utilizado para integrar as Eqs. (15) a (18), e determinar posições da chama, temperaturas e frações em massa dos reagentes para o caso de chamas cilíndricas e esféricas transientes. A condição de estabilidade, $\alpha\Delta t/\Delta\tau^2 < 1/2$, foi aplicada na pior condição, correspondendo ao máximo coeficiente de difusão não linear α em cada instante, a fim de determinar o incremento de tempo apropriado para o instante seguinte. Adotou-se simetria na origem e fluxo zero no infinito, considerado em $\bar{\eta} = 10$, nos casos analisados. Estudou-se a sensibilidade dos resultados com relação à malha, à condição de contorno no infinito e ao método de integração do coeficiente não linear. Utilizaram-se malhas com 400, 500 e 600 pontos, para 40, 50 e 60 pontos na região do combustível. Incrementos de tempo variaram de 5×10^{-8} a 10^{-6} em cada caso.

A Fig. 4 mostra a evolução das frações de massa dos reagentes com o tempo em uma chama esférica, para uma mistura de H_2/N_2 (10/90 molar) reagindo com o ar; e a Fig. 5 os efeitos das frações iniciais de combustível sobre os tempos de queima, para diversas misturas de H_2/N_2 reagindo com o ar.

Pode-se observar que os tempos de queima de chamas difusivas transientes cilíndricas e esféricas com densidade variável são reduzidos com relação às chamas com densidade constante. Assim sendo, para estimar os tempos de queima de gotas em condições supercríticas e de inclusões de gás ou, também, estimar a expansão máxima da chama, torna-se necessária a utilização da formulação para queima com densidade variável.

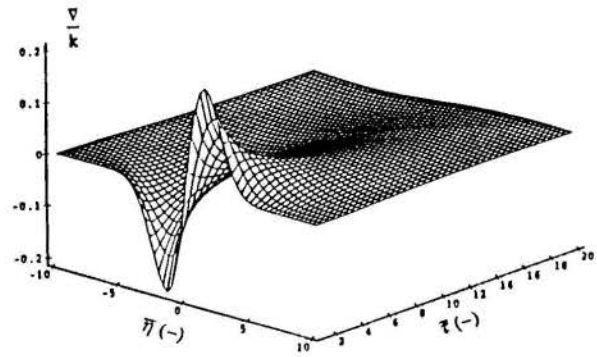


Figura 3 - Campo induzido de velocidades.

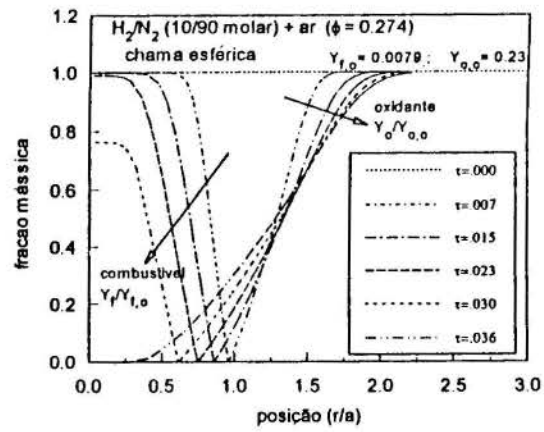


Figura 4 - Perfis de fração de massa.

CONCLUSÕES

Foram obtidas soluções analíticas e numéricas simplificadas e utilizadas para determinar os efeitos de chamas transientes unidimensionais em inclusões de gás, gotas supercríticas e *flamelets*. Essa formulação pode ser estendida para jatos planos e axisimétricos, bastando substituir o tempo pela coordenada na direção do escoamento, dividida pela velocidade do escoamento. Os gráficos obtidos mostram o efeito importante da variação de densidade sobre a queima de chamas difusivas transientes. O campo de velocidades induzido pela variação da densidade tem rápido decaimento e aumenta a expansão da chama. Mostra-se que, considerando as simplificações adotadas, ocorre um aumento da taxa de consumo de combustível e uma diminuição dos tempos de queima, quando comparadas chamas cilíndricas e esféricas com densidades variável e constante. A posição de expansão máxima da chama aumenta significativamente, uma ordem de magnitude dependendo da reação, tanto para chamas planas quanto para chamas não planas. Os perfis de fração de massa e de temperatura são alongados, diminuindo a difusão na direção da chama, porém os coeficientes de difusão variam com o inverso do quadrado da densidade, o que aumenta a difusão. A temperatura da chama não se altera, devido às simplificações

adotadas. Chamas planas com densidades variável ou constante têm os mesmos tempos de queima por manterem as mesmas taxas de consumo de combustível e apresentam as mesmas áreas de queima. No entanto as áreas de queima de chamas cilíndricas ou esféricas podem aumentar de uma ou duas ordens de magnitude. Obtiveram-se expressões analíticas para a posição e a velocidade da chama, campo de velocidades do fluido, perfis de fração de massa, temperaturas e taxas de consumo de combustível.

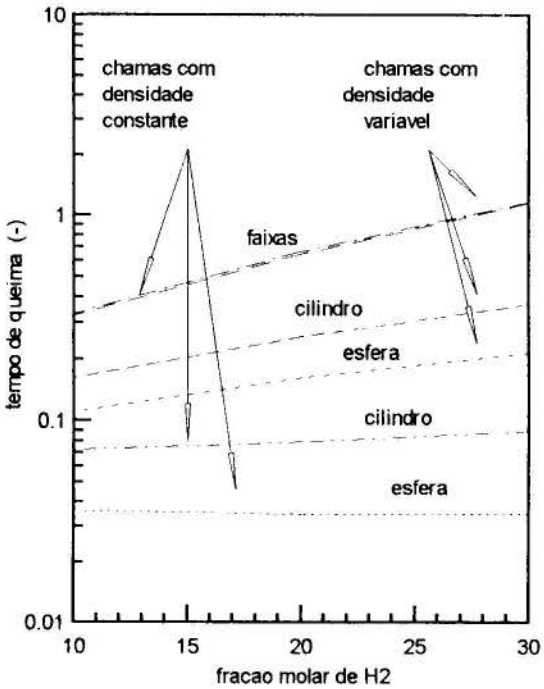


Figura 5 - Tempos de queima de chamas difusivas transientes.

APÊNDICE

As equações da queima difusiva transiente unidimensional com densidade constante são

$$\frac{\partial \beta_i}{\partial \tau} = \frac{1}{\eta^j}\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\eta^j \frac{\partial \beta_i}{\partial \eta}\right) \qquad (A.1)$$

onde β_i é a fração de mistura, $\tau = tD_0/a^2$, tempo adimensional e $\eta = r/a$ é a posição adimensional. As condições iniciais e de contorno do problema são normalizadas. As soluções são dadas por $\beta_i = \Phi_j(\eta,\tau)$, onde j=0,1,2 para coordenadas Cartesianas, cilíndricas e esféricas, respectivamente, e as funções Φ_j são

$$\Phi_0 = \left(erf\left((1-\eta)/\sqrt{4\tau}\right) + erf\left((1+\eta)/\sqrt{4\tau}\right)\right)/2 \qquad (A.2)$$

$$\Phi_1 = \frac{1}{2\tau}\exp\left(-\eta^2/4\tau\right)\int_0^1 \exp\left(-\eta'^2/4\tau\right) I_0\left(\eta\eta'/2\tau\right)\eta' d\eta' \qquad (A.3)$$

$$\Phi_2 = \Phi_0 - \left(\sqrt{\tau/\pi}/2\eta\right)\Delta(\eta,\tau). \qquad (A.4)$$

Para chamas cilíndricas a solução depende da integral da função de Bessel modificada I_0. A posição da chama η_f é obtida fazendo Y_F=Y_O=0 nas variáveis de Shvab-Zel'dovich definidas na Eq. (4), ou seja,

$$\Phi_j(\eta_f,\tau) = 1/(1+\phi) = \beta_f. \qquad (A.5)$$

Os tempos de queima τ_b são calculados tomando o limite $\eta_f \to 0$ na expressão acima, resultando em $\Phi_j(0,\tau_b) = \beta_f$. Para uma dada composição inicial, ou β_f, dado, obtem-se um valor de τ_b fixo. Daí segue que o tempo de queima é proporcional ao quadrado da dimensão inicial característica, similar à lei d^2 da queima de gotas. Os perfis de fração de massa e temperaturas são obtidos usando a Eq. (4), fazendo-se Y_F = 0 no lado do oxidante e Y_O = 0 no lado do combustível, uma vez a posição da chama seja conhecida. A temperatura da chama T_f é obtida fazendo-se Y_F =Y_O =0 na variável de Shvab-Zel'dovich para temperaturas na Eq. (4), fornecendo

$$T_f = T_0 + \frac{QY_{F,0}}{C_p}\beta_f. \qquad (A.6)$$

A velocidade adimensional da chama, v_f, é obtida diferenciando implicitamente a posição da chama, dada pela Eq. A.5:

$$v_f = \frac{d\eta_f}{d\tau} = -\frac{\partial \Phi_j}{\partial \tau}\Big/\frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta}\bigg|_{\eta=\eta_f} \qquad (A.7)$$

A taxa de consumo de combustível é dada por

$$\dot{m}_F = \rho D\frac{\partial Y_F}{\partial r}\bigg|_{r_f} = \frac{\rho_0 D_0 Y_{F,0}}{a}\frac{1+\phi}{\phi}\left|\frac{\partial \Phi_j}{\partial \eta}\right|_{\eta=\eta_f} \qquad (A.8)$$

e a percentagem residual de combustível é obtida de

$$\frac{m_F}{m_{F,0}} = (1+j)\int_0^{\eta_f}\frac{Y_F}{Y_{F,0}}\eta^j d\eta$$

$$= (1+j)\frac{1+\phi}{\phi}\int_0^{\eta_f}\left(\Phi_j - \beta_f\right)\eta^j d\eta. \qquad (A.9)$$

BIBLIOGRAFIA

Costa, F.S., 1995,"Analysis of Unsteady One-Dimensional Diffusion Flames", *PhD Thesis*, The University of Michigan.

Fendell,F.E., Bush,W.B.; Mitchel,J.A., FinkIV,S.F., 1994, "Diffusion-Flame Burning of Fuel-Vapor Pockets in Air" *Comb. and Flame*,Vol. 98: 180-196.

Karagozian,A.R.; Marble,F.E., 1986, "Study of a Diffusion Flame in a Stretched Vortex", *Comb. Sci. Tech.*, V45: 65-84.

Klajn, H.,Oppenhein, A.K., 1982, *Nineteenth Symposium (Intern.) on Combustion*, The Combustion Institute, 223-235.

Liñán, A., Crespo, A., 1976, "An Asymptotic Analysis of Unsteady Diffusion Flames for Large Activation Energies", *Combust. Sci. Tech.*, V14: 95-117.

Marble, F.E., 1983, "Growth of a Diffusion Flame in the Field of a Vortex", *Advances in Aerospace Science*, C.Casci Ed., Plenum Press, NY.

Ramos,J.I., 1987, *Annual Review of Numerical Fluid Mechanics*, Vol1: 150-243. Ed. T.C.Chawla.

Rhem,R.G.; Baum,H.R.; Tang,H.C.; Lozier,D.C., 1993, "Finite Rate Diffusion Controled Reaction in a Vortex", *Comb. Sci.Tech.*,Vol. 91:143-162.

Rosner,D.E., 1967, "On Liquid Droplet Combustion at High Pressures", *AIAA J.*, V5/No1: 163-165.

Shiah,S. M., 1992, "Dynamic Behavior of a Dense Spray Diffusion Flame in a Potential Vortex", *PhD Thesis*, The University of Michigan.

Spalding,D.B, 1959, "Theory of Particle Combustion at High Pressures", *ARS J.*, Vol. 29: 828-835.

Williams, F.A., 1985, *Combustion Theory*, 2a. ed, Benjamin Cummins, Califórnia.

ABCM

MODELAGEM DE PROCESSOS QUÍMICOS DESEQUILIBRADOS E DA EMISSÃO NO_x EM CÂMARA DE COMBUSTÃO DE TURBOMOTOR

Krioukov V.G.
UNIJUÍ . Programa de Pôs Graduação em Modelagem Matemática
CP 560 98700-000 Ijuí - RS Brazil

Demin A.B. , Abdulline A.L.
UETK . Departamento de Ciências Térmicas. Rua K. Marx. 10. 42011
Rua K. Marx . 10 . 420111 Kazan - Rússia

RESUMO

Apresenta-se um modelo matemático para prognosticar a emissão de poluentes de câmaras de combustão dos turbomotores. O modelo considera a combustão em frente de chama, a mistura do escoamento reagente com o ar dos anéis de admissão, o mecanismo detalhado das reações químicas sob temperaturas altas. Foram realisadas as pesquisas numéricas para avaliar a influência da alteração dos regimes do funcionamento e da introdução do amoniáco em produtos de combustão nas características da emissão.

INTRODUÇÃO

Os turbomotores de avião são a grande fonte de emissão dos poluentes: CO, NO_X, HC (hidrocarbonetos não queimados) C* (fuligem). Há muitos anos estão sendo realizadas pesquisas teóricas e experimentais para diminuí-los. Sabe-se que a origem principal da formação dos poluentes é a câmara de combustão do turbomotor, e por isso, o problema de projeto de câmara pouco poluente é importante. Para resolvê-lo, é necessário (entre outros) elaborar os modelos matemáticos dos processos de combustão e de formação dos poluentes em câmaras.

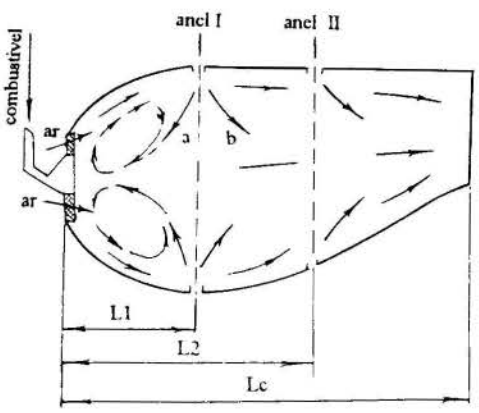


Fig. 1 Esquema da câmara de turbomotor

Na fig.1 está representado o esquema típico da câmara, que inclui: um injetor de "combustível" + "ar" em torção, o primeiro (ar I) e o segundo (ar II) anel da admissão do ar, os orifícios para assegurar o acesso do ar para defender as paredes da câmara. O "ar I" divide-se em dois escoamentos:

- o escoamento para o injetor onde é realizada a mistura com o combustível e o "ar em torção" (toda esta mistura forma o começo do fluxo principal);
- o escoamento ao longo da câmara para misturar-se com o fluxo principal.

No começo deste fluxo, surge uma frente de chama em que a mistura inicial transforma-se em produtos de combustão. Todos os processos são realizados em condições de grande turbulência.

É evidente que o quadro dos processos em câmara é muito complexo para a modelagem matemática, devido as transformações químicas complexas, ao escoamento tridimensional com os fluxos inversos, à turbulência considerável e a mistura dos componentes. Por isso, realizam-se modelos separados como, por exemplo para a combustão principal (Raushenbakh, 1964) ou para prognosticar os poluentes, com várias suposições simplificadas. Estes modelos, como regra, utilizam amplamente os dados experimentais.

No presente trabalho, está desenvolvido um modelo para prognosticar a quantidade de poluentes. A parte mais complexa deste modelo é o bloco de cálculo das transformações químicas em condições de alta temperatura, que deve considerar o mecanismo detalhado de transformações em quadros da cinética química formal. A parte "gasodinâmica" é simplificada e está orientada nos dados experimentais das características do fluxo.

ESQUEMA FÍSICO

Elaborando o esquema dos processos foram propostas as seguintes hipóteses simplificadas:

- o fluxo na câmara de combustão é unidimensional;
- a pressão na câmara é constante;
- o combustível chegando em frente de chama fica na fase gasosa;
- a influência da camada do ar sobre a parede da câmara não é levada em conta;
- a velocidade dos produtos de combustão é insignificante e não influi na sua entalpia.

Propõe-se que sejam conhecidas:

- a alteração da área do fluxo ao longo da câmara (esta área não corresponde à área da câmara porque dentro dela existem os escoamentos inversos e as zonas de redução das áreas por conta dos jatos de ar dos anéis I e II).
- a distribuição da velocidade da mistura do ar $\dot{m}_x$ dos anéis de admissão no fluxo principal.

O esquema físico e o modelo matemático levam em conta:

- a combustão em frente da chama;
- a interação química (nos quadros da cinética química formal) ao longo de toda câmara;
- a influência mútua do calor das reações químicas e as características do fluxo;
- a distribuição do ar dos anéis de admissão e a sua influência nas características do escoamento.

O esquema dos processos ao longo da câmara está representado na fig.2, onde :

1 - zona da frente de chama (G = const.; I = var)
2 - combustão (tranformações químicas) em escoamento (G=const.; I = const.)
3 - admissão da parte II do ar do anel I (G = var.; I = var)
4 - combustão em escoamento (G = const.; I = const)
5 - admissão do ar no anel II (G = var; I = var)
6 - combustão em escoamento (G = const.; I = const.)
G , I - são o consumo e a entalpia dos produtos de combustão no escoamento principal, respectivamente.

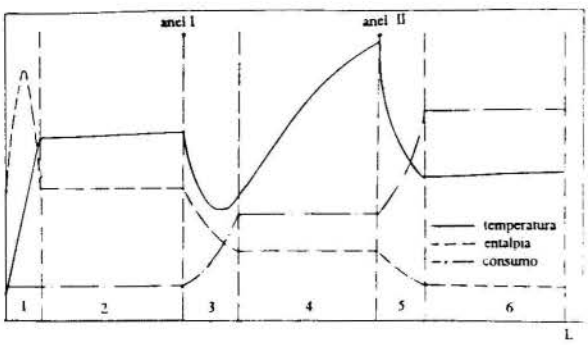


Fig. 2 Esquema físico dos processos ao longo da câmara

MODELO MATEMÁTICO

De acordo com o esquema físico o fluxo divide-se nas zonas 1-6; cada uma caracteriza-se por várias particularidades, mas existe um processo comum (a combustão e a formação de poluentes) para todas as zonas. A modelagem deste processo é realizada com a utilização do conceito de "reator homogêneo não-estacionário" (nRMP) e as equações correspondentes estão desenvolvidas em Krioukov (1989). As equações da cinética química apresentam-se em forma que permite variar o volume no processo de combustão, trocar o calor com o meio ambiente , admitir a admissão ($\dot{m}_i^+$) e o escape ($\dot{m}_i^-$) de substâncias (no caso geral $\dot{m}_i^+ \neq \dot{m}_i^-$). Para nosso modelo convencionamos que reator move-se com a velocidade do gás. Para um sistema reagente (V- o seu volume) existe um composto de " n " substâncias individuais ($A_1 ... A_n$), entre as quais ocorrem "m" reações elementares reversíveis:

$$\sum_i \nu'_{ij} A_i \leftrightarrows \sum_i \nu''_{ij} A_i \qquad i=1...n \ , \ j=1...m;$$

onde: ν'_{ij}, ν''_{ij} - são os coeficientes estequiométricos das reações, e as "r" reações de troca de massa:

$$\sum_i \nu'_{ij} A_i \rightarrow \sum_i \nu''_{ij} A_i \qquad i=1...n, \ j=(m+1)...(m+r);$$

as quais identificam a admissão (ou o escape) das substâncias no (ou do) reator. Por exemplo, a admissão de H_2O no resultado da evaporação no reator pode ser imitada pela reação unilateral de ordem zero: $\rightarrow H_2O$ e a sua constante de velocidade determina-se pela fórmula: $k_{ag} = \dfrac{\dot{m}_{ag}^-}{\mu_{ag} V}$;

Determinando tais constantes em conformidade com as equações da cinética química pode-se incluir as reações de troca no mecanismo comum das reações. A forma definitiva das equações da cinética química será a seguinte:

$$\frac{d\gamma_i}{d\tau} = -e^{\gamma_i} \sum_j \nu_{ij} \Omega_j + \sum_q \sum_j \nu_{qj} \Omega_j \ : \qquad (1)$$

onde : $i, p, q = 1...n; \quad j=1...(2m+r);$

$$\Omega_j = k_j (P/R_0 T)^{\overline{m}_j} \exp(-\sum_p n_{pj} \gamma_p);$$

$$\overline{m}_j = m_j - 1 + \sum_p n_{pj}; \qquad \gamma_i = -\ln r_i \ :$$

$$\nu_{ij} = \nu''_{is} - \nu'_{is}; \quad n_{ij} = \nu'_{is}; \quad j=s; \quad s=1...m;$$

$$\nu_{ij} = \nu'_{is} - \nu''_{is}; \quad n_{ij} = \nu''_{is}; \quad j=s+m; \quad s=1...m;$$

$$\nu_{ij} = \nu''_{is} - \nu'_{is}; \quad n_{ij} = \nu'_{is}; \quad j=s+m; \quad s=(m+1)...(m+r);$$

r_i - é a concentração molar da substância "i"; m_j - é o índice de participação na reação "j" da partícula catalítica (m_j=1 ou 0); p - é a pressão; T - é a temperatura; k_j - é a constante de velocidade da reação " j ". Algumas substâncias podem estar na fase condensada; para levá-las em conta nas equações (1) utiliza-se o método das "grandes moléculas". Este método foi criado por Khudiakov (1973) e está apresentado em português em Krioukov (1995). As equações (1) permitem calcular (nas situações reais) as concentrações pequenas, o que é importante para os problemas da previsão da emissão de poluentes. O nRMP move-se e por isso é razoável apresentar as equações (1) na forma:

$$\frac{d\gamma_i}{dx} = \frac{1}{V_m}(-e^{\gamma_i} \sum_j \nu_{ij}\Omega_j + \sum_q \sum_j \nu_{ij}\Omega_j) \equiv f_i^{\gamma} \qquad (2)$$

Além disso, no sistema reagente existe uma correlação:

$$F_T \equiv I_m - \sum_i I_i r_i \Big/ \sum_i \mu_i r_i = 0 \qquad (3)$$

onde: I_m - é a entalpia do gás ; I_i, μ_i - são a entalpia e a massa molecular da substância "i".

A quantidade das equações é igual ao número das substâncias reagentes participantes nas transformações químicas. Para prognosticar os processos energeticamente importantes, é suficiente levar em conta somente algumas substâncias e reações principais, por exemplo, menos de 10 substâncias e de 20 reações. Mas, para modelar os processos ecologicamente importantes, é necessário considerar maior número de substâncias e reações químicas, por exemplo, nas pesquisas numéricas deste trabalho o meio reagente incluiu mais de 25 substâncias e de 100 reações.

Escrevemos os modelos e as equações restantes para cada zona do escoamento.

1. *Frente de chama (zona 1).* É uma zona fina, na qual entra a mistura do combustível e ar e saem os produtos de combustão de alta-temperatura. A frente de chama é estável porque os produtos de combustão entregam pela condutibilidade térmica (λ) e difusão, à mistura inicial o calor e alguns radicais, que provocam a combustão da mistura dentro da frente. Em nosso trabalho, é utilizado o modelo térmico da frente (Frank-Kamenetski, 1988), que não considera a difusão das substâncias contra o fluxo. Mas transformamos as equações do modelo (Frank-Kamenetski, 1988) de forma, a permitir eliminar a condição do "equilíbrio químico" no limite x=+∞. Esta condição provoca algumas dificuldades para os problemas com muitas substâncias, incluindo os poluentes do tipo NO_x.

As equações transformadas estão representadas em forma de (sem deduções):

- equação "da onda de entalpia" :

$$\frac{dT}{dx} = \frac{\rho_m w_m}{\lambda}(I - I_m); \qquad (4)$$

onde : $\rho_m . w_m . I_m$ - são a densidade, a velosidade e a entalpia da mistura inicial;

- equação da conservação da massa :

$$F_w \equiv w - \frac{\rho w R_0 T}{P\mu} = 0; \qquad (5)$$

- equações (2), (3).

No limite "frio" são prescritas: a composição da mistura inicial (r_i^m) e I_m (entalpia da mistura). No limite "quente" existe uma condição: $I \to I_m$. O valor w_f (velocidade da frente de chama) é incógnito. O cálculo é realizado pelo método de iterações:

a) escolhe-se algum valor w_m^0 :

b) integra-se o sistema (2)...(5);

c) se a diferença ($\Delta I = I - I_m$) aumenta (fig.3), significa que $w_m^0 > w_f$ e é preciso diminuir w_m^0 e voltar ao ponto a);

d) se a diferença ΔI mudando com um máximo diminui menos que "0", significa que $w_m^0 < w_m$ e é preciso aumentar w_m^0 e voltar ao ponto a).

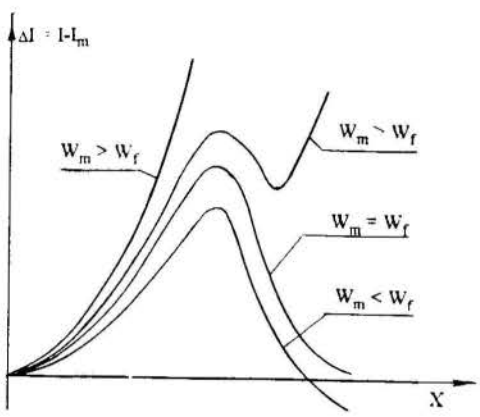


Fig. 3 Alterações da entalpia no cálculo da frente de chama

Usando este método, é possível determinar o valor exato w_m e todas as características da frente de chama (incluindo o conteúdo dos poluentes). Este algoritmo é preferível do que a utilização do método conhecido (Frank-Kamenetski, 1988) com a condição do equilíbrio químico no limite "quente", porque o equilíbrio químico de alguns poluentes (por exemplo, NO) não se consegue na câmara de combustão. Observamos que a frente de chama (se aplicar o modelo térmico) pode-ser imitada por alguma "onda" da entalpia (linha *c* , fig.3) no escoamento normal.

2. *Escoamento normal (zonas 2, 4, 6)* não possui as alterações de consumo e de entalpia (G = const.; I = const.) mesmo que a temperatura mude porque o escoamento é desequilibrado e as transformações químicas continuam.

As equações para descrevê-lo são:

- conservação da massa:

$$F_G = G - \frac{P\mu w A(x)}{R_o T} = 0; \qquad (6)$$

e as equações (2), (3). A função A(x) é conhecida.

3. *Escoamento com a admissão do ar (zonas 3, 5)* possui a alteração do consumo (que é conhecido $\dot{m}_x$) e a mudança da entalpia e é descrita pelas equações (que estão mostradas sem dedução):

- mudança do consumo e da entalpia:

$$\frac{dG}{dx} = \dot{m}_x ; \qquad (7)$$

$$\frac{dI}{dx} = (I_{ar} - I)\frac{\dot{m}_x}{G} ; \qquad (8)$$

e equações (2), (3), (6).

Observamos que para estas zonas é necessário no mecanismo das transformações químicas incluir as "reações" da admissão da massa: $\to N_2$; $\to O_2$ (de ordem nula) com as constantes de velocidade:

$$k_j = \frac{\dot{m}_x g_j}{1000\mu_j A(x)}; \qquad j = N_2 , O_2 ;$$

onde : g_j são as frações mássicas do N_2 e O_2 no ar.

ALGORITMO e PROGRAMA

O algoritmo do cálculo deste sistema determina-se pelas propriedades das equações da cinética química que pertencem ao tipo dos sistemas "rígidos" de equações diferenciais. Pode-se integrá-las só com a aplicação do esquema de cálculo "implícito-diferencial", um dos quais (esquema de Pirumov, 1978) foi realizado no algoritmo. A descrição do algoritmo está mostrada em (Krioukov, 1995).

O software conserva todo o nível da universalidade que foi previsto pelo modelo matemático, ou seja, é invariante em relação às substâncias reagentes e às reações químicas. Por isso, o software pode executar os cálculos para diferentes sistemas reagentes e tem ampla difusão. A informação necessária, que está no arquivo de dados, inclui: a tabela das propriedades de substâncias individuais; a informação sobre as reações químicas; os dados iniciais.

PESQUISAS NUMÉRICAS

Na base do software elaborado foram realizadas várias pesquisas numéricas.

1. Influência de α_{ox}^0 na emissão de poluentes. Escolhemos para as investigações numéricas um regime básico para a câmara de combustão típica com tamanhos: L_1= 7cm; L_2= 15cm; L_c=22cm; e os parâmetros: T_{ar}= 973K; P_c = 20atm; $\alpha'_{ox} = 0.4$; $\alpha''_{ox} = 1.4$; $\alpha^{\Sigma}_{ox} = 2.2$. (ver a fig.2). O querosene apresenta a mistura de vários hidrocarbonetos. As funções $\dot{m}_x$ e A(x) ao longo da câmara foram obtidas em pesquisas experimentais (Jankovski, 1986). O meio reagente foi apresentado através das 26 substâncias e das 102 reações químicas elementares (inclusive as reações de pirólise dos hidrocarbonetos e da formação de NO e NO_2).

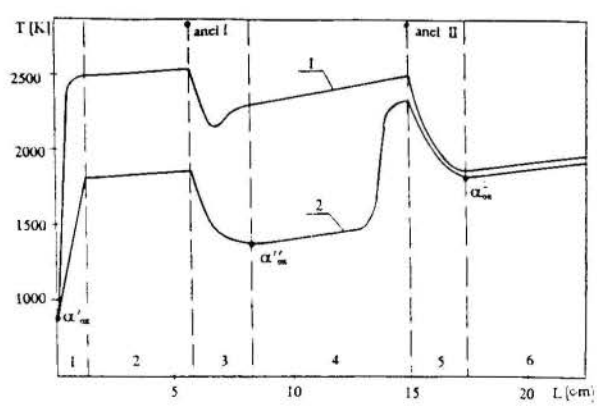


Fig. 4 Distribuição da temperatura dos produtos de combustão ao longo da câmara

Nas fig.4 e 5 estão representadas as distribuições de T e NO_x ao longo da câmara para os dois regimes:

- regime I ($\alpha'_{ox} = 0.7; \alpha''_{ox} = 1.4; \alpha^{\Sigma}_{ox} = 2.2$) .
- regime II ($\alpha'_{ox} = 0.4; \alpha''_{ox} = 1.4; \alpha^{\Sigma}_{ox} = 2.2$):

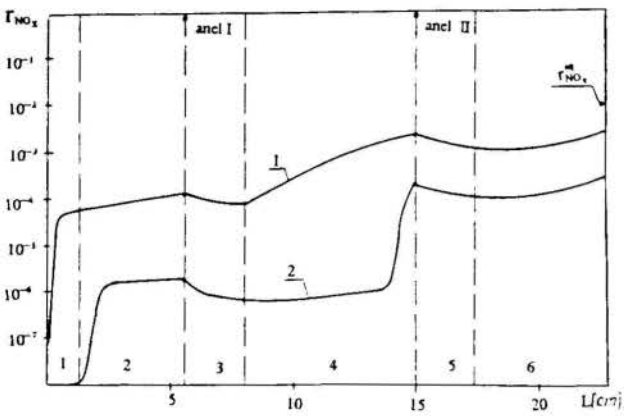


Fig. 5 Alteração do NO_x ao longo da câmara

No regime I a temperatura aumenta muito na frente de chama e na zona 2 é praticamente constante. Ao mesmo tempo, a concentração de NO não aumenta consideravelmente . Na zona 3 o fluxo principal admite o ar do anel 1 de acordo com a função $\dot{m}_x$ e é evidente que a mudança da temperatura e NO determinam-se pelos dois processos:

- a mistura do ar com o escoamento principal;
- as reações químicas da combustão.

Na entrada da terceira zona este regime possui temperatura alta (~2500K) e $\alpha_{ox} \approx 0.7$ por isso, as principais reações energéticas passam mais rapidamente e a temperatura (atravessando o ponto $\alpha_{ox} = 1$ praticamente sem o seu aumento) consegue na saída da zona 3 no ponto $\alpha'_{ox} = 1.4$ o valor equilibrado ($T_3 < T_2$). Ao mesmo tempo, a concentração NO_x aumenta aspirando conseguir o equilíbrio químico (ou seja, ao valor equilibrado NO_x corresponde $\alpha_{ox} = 1.4$; este valor é muito grande). No trecho 4 a temperatura não se modifica; a concentração NO_x continua a aumentar até o valor alto (r_{NO_x}=900ppm) mas ainda não consegue o equilíbrio químico devido às baixas velocidades das reações na formação de NO_x. Na zona 5, no escoamento principal injeta-se uma nova porção de ar (pelo anel II) e a temperatura diminui até 2000K . As reações químicas praticamente já não passam, pois não "encontram" um componente combustível (α_{ox} aumenta de 1.4 até 2.2). As reações de formação de NO_x também param devido às baixas velocidades e a concentração NO_x diminui pela diluição dos produtos de combustão com o ar. No trecho 6 as transformações químicas são insignificantes pela falta de tempo, mesmo que algumas alterações ocorram (por exemplo: a combustão suplementar do CO, HC, C*, etc.). Mas a concentração NO_x fica em nível não admissível, na saída da câmara.

Para o regime II ($\alpha^0_{ox} = 0.4$) na zona 1 (em frente da chama), a temperatura não é tão alta como no regime I e por isso, o NO_x não se forma. Na zona 2 a temperatura é constante, mas o NO_x começa a formar-se. Na zona 3, devido a admissão de ar (anel I), a temperatura e o NO_x caem. Outro fator que deve aumentar a temperatura e a concentração do NO_x (reações de combustão) age lentamente. Por isso, no início da zona 4 (a mistura com ar já terminou) as características do fluxo não se alteram. Mas, perto do término desta zona, os processos químicos, acumulando radicais livres, rapidamente (é conhecida esta propriedade das reações com ramificações nos processos em cadeia) conseguem altas taxas. No resultado, rapidamente aumenta a temperatura (até o nível do equilíbrio químico) e a concentração NO_x (até ≈ 200ppm). Mas, devido à falta de tempo, o NO_x não consegue o equilíbrio antes da entrada na zona 5. Nesta zona, uma nova porção do ar mistura-se com o escoamento principal e a temperatura diminui. Os processos químicos "esfriam". A concentração NO_x baixa devido a diluição no ar (até ≈ 120ppm). Na zona 6 (α_{ox}=2.2) as características do fluxo praticamente não se alteram (além da concentração CO que diminui, mas não está representado na fig.4, 5). Comparando ambos os regimes, pode-se observar que o regime II é preferível do ponto de vista da emissão do poluente NO_x .Na base do software elaborado, foram pesquisadas as influências de outros fatores (de construção e de regimes) na formação dos poluentes em câmaras de combustão de turbomotores.

2. Influência da injeção NH_3 em câmara de combustão para emissão NO_x .Cálculos preliminares mostram que em algumas condições, a injeção NH_3 em fluxo de alta-temperatura com vários gases (inclusive NO, NO_2) pode diminuir a concentração NO_x seguindo a reação total (Kalvert, 1988) :

$$NO + NH_3 + 1/4O_2 = N_2 + 3/2H_2O.$$

Nosso mecanismo de transformações químicas (sendo mais detalhado e mais exato) incluiu (entre outras) 32 reações elementares com participação de NO_x . Por investigar a influência da injeção NH_3 em câmaras reais, foi escolhida a câmara de um turbomotor típico. Nas fig. 6, 7 estão representadas as distribuições da T e do NO_x ao longo da câmara, nos regimes principais de funcionamento do turbomotor: maximal ou de decolagem ($\bar{R} = 1$); nominal ($\bar{R} = 0.85$); de pouso ($\bar{R} = 0.35$); de rolagem ($\bar{R} = 0.07$). A câmara possui 2 anéis de admissão. Diferente das figuras 4 e 5, as alterações das características não são detalhadas.

A formação mais intensiva do NO_x ocorre sobre a temperatura T > 2000K e por isso, no início, foi pesquisada a variante da injeção do NH_3 em zona de altas temperaturas. Mas a diminuição do NO_x não acontece e até ao contrário a concentração do NO_x na saída da câmara aumenta. Então foi pesquisada a variante da injeção do NH_3 pelo segundo anel da admissão, onde a temperatura do escoamento é T≈ 1200 K, que corresponde ao regime de decolagem.

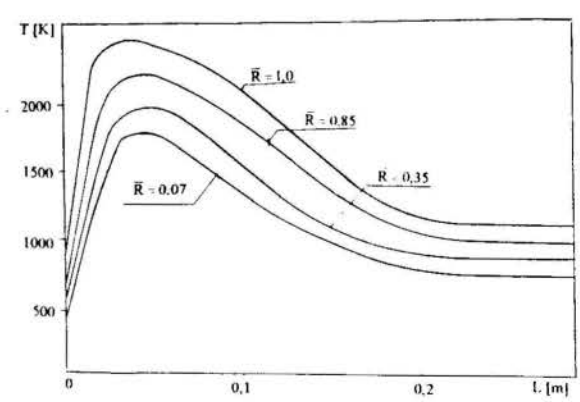


Fig. 6 Alteração da temperatura ao longo da câmara em vários regimes

O consumo do NH_3 varia $1 < Z < 1.5$, onde $Z = \frac{r_{NH_3}}{r_{NO_x}}$

Se $Z > 1.5$ nos produtos de combustão, surge o excesso do NH_3, se $Z < 1$ surge a sua falta.

Os cálculos realizados mostram que a emissão NO_x baixou em ~25% (fig.8).

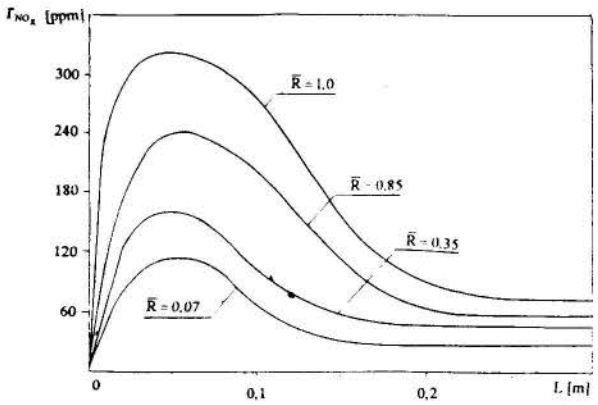


Fig. 7 Alteração do No_x ao longo da câmara em vários regimes

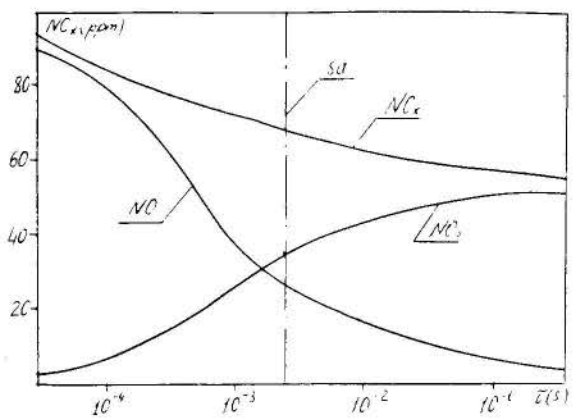


Fig. 8 Influência do NH_3 na diminuição da concentração do NO_x ($\bar{R}=1$); sa - secção da saída do turbomotor

Os resultados acima citados mostram que depois do anel II, a concentração NO_x não muda se não injetar NH_3. Observamos que a diminuição do NO_x continuou depois da saída da câmara do turbomotor. Os cálculos ulteriores prognosticam que o NO_x pode baixar até 60%. Para o regime nominal $T \approx 1050K$ foram obtidos quase os mesmos resultados.

Para os regimes de pouso e de rolagem, os processos de diminuição do NO_x passam lentamente, sua concentração baixa somente em 10%. Observamos que a efetividade da injeção do amoníaco depende consideravelmente dos níveis da temperatura e da pressão, das distribuições do ar entre os anéis, das posições dos anéis na câmara, das características da mistura do combustível com ar no início da câmara, etc.

Por isso, é difícil fazer conclusões diretas. Se é necessário avaliar para algum tipo de turbomotor a influência da injeção do NH_3 na concentração NO_x, é preciso realizar as correspondentes pesquisas numéricas.

3. Previsão das características de emissão dos combustíveis alternativos. No tempo atual realizam-se as pesquisas para criar os turbomotores com os novos combustíveis: o metano (CH_4), o hidrogênio (H_2), os hidrocarbonetos pesados. A previsão das características de emissão destes combustíveis é uma parte importante destas pesquisas.

Em particular, é necessário resolver os problemas:

- previsão da emissão dos poluentes em produtos de combustão dos combustíveis novos para aplicar nos turbomotores existentes;
- realização e análise comparativa das características de emissão de vários combustíveis;
- elaboração das recomendações para alterar os regimes de funcionamento e os esquemas de construção com o objetivo de diminuir a concentração de poluentes;
- avaliação das características de emissão no processo de pesquisa e implantação dos novos esquemas de construção do motor.

Nesta direção (com base no software elaborado), foram realizados os cálculos com o objetivo de prognosticar as características de emissão dos bipropelentes: "H_2 + ar" (V1), "Querosene + ar" (V2), "CH_4 + ar" (V3).

Os parâmetros da câmara de combustão, os regimes de funcionamento e as distribuições: A(x), $\dot{m}_x$ corresponderam aos dados do regime II do item 1.

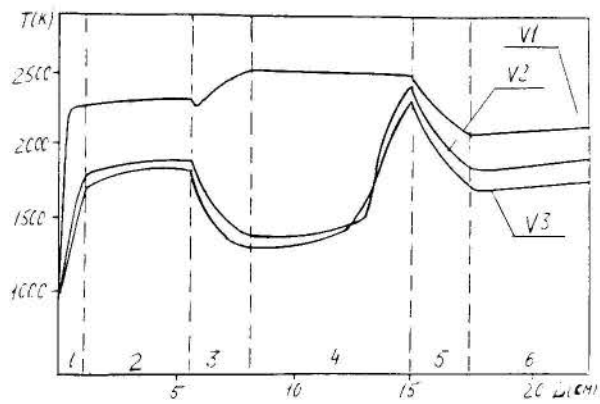


Fig. 9 Mudança da temperatura ao longo da câmara para vários combustíveis

Nas figuras 9, 10 estão representadas as distribuições comparativas da T e NO_x para os três tipos de combustíveis.

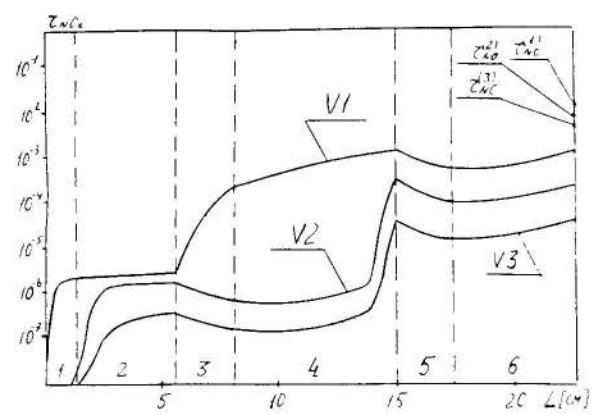


Fig.10 Mudança do NO_x ao longo da câmara para vários combustíveis

Pode-se fazer as seguintes observações:

a) o hidrogênio possui grande atividade química e por isso a frente da chama para a variante V1 tem espessura menor do que para as V2, V3;

b) na variante V1 a temperatura (zonas 1, 2) obtém rapidamente o valor de equilíbrio químico (mais alto do que para as variantes V2 e V3), mas a concentração NO_x ainda está distante do valor equilibrado e é pequena (~1ppm);

c) na zona 3 para a variante V1 a temperatura praticamente não diminui quando mistura-se com o ar, também não se observa o seu máximo sobre $\alpha_{ox}=1$; nas variantes V2, V3 as temperaturas

diminuem devido a diluição dos produtos de combustão do ar e do retardamento das reações químicas;

d) na zona 4 para a variante V1 a temperatura não se altera e a concentração NO_x aumenta rapidamente até alto nível, mas não obtém o valor equilibrado; para as variantes V2, V3 as transformações químicas ocorrem lentamente e as temperaturas aumentam essencialmente somente no final da zona: mesmo que as temperaturas no final da zona para todas as variantes são próximas, as concentrações NO_x distinguem-se consideravelmente entre si: V1 (~1000ppm), V2 (~200ppm), V3 (~50ppm);

e) na zona 5 as temperaturas e as concentrações NO_x baixam devido à diluição do ar no anel II e na zona 6 as reações químicas praticamente param.

Mesmo que com base neste exemplo não seja possível fazer as conclusões comuns, podemos observa que:

- a combustão do hidrogênio pode formar um nível muito perigoso do poluente NO_x apesar de ser considerado um combustível ecologicamente limpo;
- o metano possui nível menor de NO_x mas também provoca baixas velocidades das reações de combustão, que pode prejudicar as características do gás de trabalho.

A presente pesquisa foi realizada com o apoio do CNPq e RFFI (Fundação das Pesquisas Fundamentais da Rússia).

CONCLUSÃO

1. Na base do modelo (Krioukov, 1989) foi elaborado um modelo matemático, algoritmo e software para prognosticar a formação e emissão de poluentes de turbomotores de avião, que permitem avaliar a quantidade de vários poluentes em dependência do regime de funcionamento do turbomotor, das condições do vôo, do tipo de combustível e de alguns fatores de construção.
2. Foram realizados os cálculos para avaliar a influência do α^{o}_{ox} na emissão de poluentes.
3. Foram realizadas as pesquisas numéricas para avaliar a efetividade da injeção NH_3 em escoamento dos produtos de combustão na diminuição da concentração do NO_x.
4. Foram realisados os cálculos da emissão de poluentes de turbomotores para avaliar as características ecológicas de alguns combustíveis alternativos.

BIBLIOGRAFIA

Alemasov V. E., Dregalin A. F., Tishin A.P , Khudiakov K., Kostin A., 1973, "As propriedades termodinâmicas e termofísicas de produtos de combustão", Guia, Vol.3, VINITI, Moscov.

Gardiner W. 1988, "Quimica da combustão". Mir, Moscov.

Frank-Kamenetski D., 1988, "Difusão e transmissão do calor na cinética química", Nauca, Moscov, 502 p.

Jancovski V. M., 1986, "Modelagem da zona de combustão de câmaras de combustão de turbomotor", Tecnica de Aviação, N1, pp. 73-76.

Kalvert C., Inglund G., 1988, "Defesa da atmosfera de poluentes industrirais", Metallurgia.Moscov.

Krioukov V. G., 1989, "Modelo de cinética de um reator", Cap.6, pag. 57-76 em livro Alemasov V. E., Dregalin A. F., Krioukov V. G., Naumov V. I.,"Modelagem matemática dos processos de alta temperatura em instalações energéticas". Nauca. Moscov.

Krioukov V. G., 1995, "Modelagem matemática para emissão de poluentes", Anais do COBEM-CIDIM/95,Belo-Horizonte MG.

Pirumov U. G., Rosliakov G. S., 1978, "escoamentos de gâs em tubeiras", Universidade MGU, Moscov.

Raushenbakh B. V., et al., 1964, "Fundamentos fisicos dos processos em câmaras da combustão de turbomotóres", Mashinostroenie, Moscov.

Westbrook C. K.,Dryer F.L.,1984, "Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion", Prog. Energy Combust. Sci., Vol.10, pp. 1-57.

ABSTRACT

It is showed a mathematical pattern in order to prognosticate the emission of pollutants in combustion chambers of turbo-engines. The pattern considers: combustion in front of flame, the mixture of the reagent flowing off with the air of the admission valves, the detailed mechanism of the chemical reactions on high temperatures. Numerical researches were produced in order to evaluate the influence, in the characteristics of the emission, about the change of the function regimens and about the introduction of ammonia in the combustion products.

ESTUDO DO PROCESSO DE COMBUSTÃO DE QUEROSENE EM AR EM CONDIÇÕES DE ESTABILIZAÇÃO AERODINÂMICA DA CHAMA.

Oleg A.Khatchatourian.
Departamento de Física,Estatística e Matemática.
Universidade de Ijuí-UNIJUÍ. DeFEM
Rua São Francisco,501,Cx.P.560-98700-000-Ijuí-RS-Brasil.

RESUMO

Neste trabalho apresentamos os resultados de um estudo teórico/experimental do processo de combustão de querozene em ar em condições de estabilização aerodinâmica de chama. É proposto um método de cálculo de liberação de calor em câmara com condições não uniformes de distribuição de combustível. Mostra-se que a realização do processo de combustão em duas fases permite melhorar significativamente o rendimento de combustão em temperaturas reduzidas. Foi elaborado e testado um estabilizador aerodinâmico em dois estágios.

INTRODUÇÃO.

Para manter uma chama em um fluxo com alta velocidade, geralmente usam-se as zonas de recirculação formadas atrás de corpos aerodinamicamente desfavoráveis. A zona de recirculação pode ser obtida também como resultado de interação do fluxo principal com os jatos transversais, em particular, de forma anelar (figura 1):

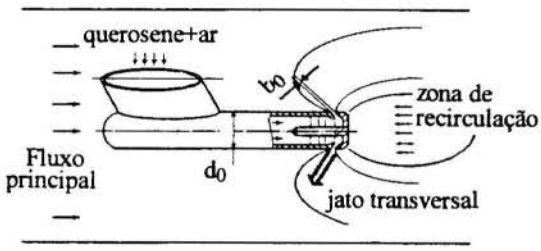


Figura 1. Esquema de um estabilizador aerodinâmico.

A possibilidade de regulagem contínua do domínio de estabilidade e de intensidade do processo de combustão em jatos transversais, resfriamento efetivo e unificação das funções de estabilização e de alimentação, justifica a aplicação dos estabilizadores aerodinâmicos em câmaras secundárias de turboreatores (Alverman W. e Ulken R., 1971, Khatchatourian et al., 1992-1994), em secadores de grãos para intensificação do processo de secagem e em outros equipamentos para aquecimento do ar movido.

O processo de combustão em fluxo turbulento depende significativamente dos parâmetros hidrodinâmicos (intensidade e escala de turbulência) e físico-químicos (temperatura, pressão e composição) de fluxo da mistura inicial. Isto exige que o estudo da própria combustão seja acompanhado pelo estudo de distribuição das concentrações, temperaturas, velocidades e características de turbulência atrás da zona de recirculação.

Neste trabalho estão apresentados os resultados de um estudo teórico/experimental do processo de combustão de querosene em ar em condições de estabilização aerodinâmica de chama. Foi estabelecido que o baixo rendimento de combustão para temperaturas baixas do fluxo é motivado pelo "congelamento" da combustão em regiões periféricas da câmara com concentrações reduzidas de combustível.

É proposto um método de cálculo de liberação de calor em câmara com condições não uniformes de distribuição de combustível. Para o cálculo da velocidade turbulenta de propagação da chama e do tempo característico de combustão nestas condições, o método utiliza as características experimentais de turbulência do "rastro" do estabilizador aerodinâmico, obtidas em regimes sem combustão. O sistema das equações é apresentado por Khatchatourian et al. (1992).

Mostra-se que a realização do processo de combustão em duas etapas permite melhorar significativamente o rendimento de combustão em temperaturas reduzidas. Foi elaborado e testado o estabilizador aerodinâmico em dois estágios.

1. EQUIPAMENTO EXPERIMENTAL E INTERVALOS DA VARIAÇÃO DOS PARÂMETROS.

Na figura 2 está representado o equipamento experimental utilizado para o estudo de liberação do calor atrás de jato transversal anelar formado pela mistura de ar e querosene.

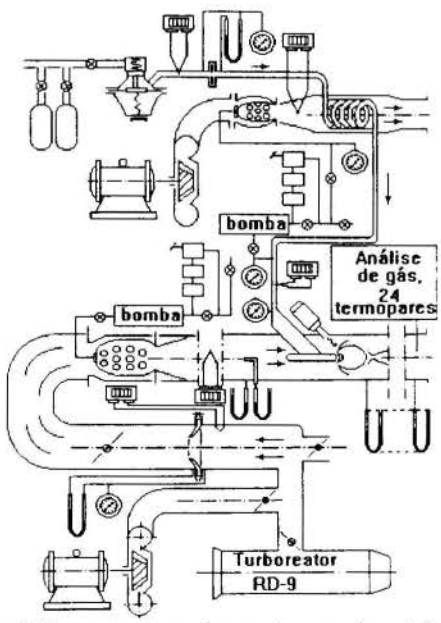


Figura 2. Esquema do equipamento experimental.

O equipamento possui duas vias de ar : de baixa e alta pressão. Como fonte de ar do fluxo principal, usou-se um ventilador com potência 100 kW. Para obtenção das vazões e velocidades elevadas do fluxo principal, o ar foi tomado depois do compressor do turboreator RD-9B (até 10 kg/s). O ar comprimido foi obtido através do sistema dos redutores de uma bateria de alta pressão (~200 atm.) ou diretamente de um compressor com potência 200 kW.

Foram variados os seguintes parâmetros:

Fluxo principal : T_W = 340 - 923 K; W = 40 ÷ 250 m/s, D = 200 mm (diâmetro do canal); Re = (0,46 - 30) 10^5.

Jato transversal : T_V=340 - 723 K; β_0= 90°; 135° (ângulo de saída do jato); b_0 = 0,8; 1,4 mm (espessura do bocal anelar); d_0 = 24; 27; 30; 36 mm (diâmetro do tubo do estabilizador aerodinâmico); q_v = 6-120 (parâmetro hidrodinâmico = razão entre as cargas cinéticas do jato e do fluxo); $\alpha_v = g_a / g_c L_0$ - coeficiente do excesso do ar em relação ao combustível; $\alpha_V \in \left(\alpha_{v_{min}}; \alpha_{v_{max}}\right)$, onde $\alpha_{v_{min}}$ e $\alpha_{v_{max}}$ são as composições nos limites de combustão.

A dinâmica da liberação do calor foi determinada experimentalmente pela medida de variação da pressão estática ao longo da câmara experimental, resolvendo o sistema das equações de conservação de massa, momento linear, energia e estado para fluxo unidimensional. Os valores do rendimento da combustão foram calculados pelo método de balanço térmico [na saída da câmara foram colocados 24 termopares (cromel - alumel) , 4 em 6 centros de áreas iguais] e pela análise dos produtos de combustão (foram utilizados o cromatógrafo XT-8 e os analisadores de composição dos produtos de combustão GEUK-21 , GUX-1 e VTI-2).

2. ESTUDO DO PROCESSO DE LIBERAÇÃO DE CALOR ATRÁS DE JATO TRANSVERSAL ANELAR FORMADO PELA MISTURA VAPORIZADA DE QUEROSENE E AR.

Os experimentos mostram que o rendimento térmico η em condições de estabilização aerodinâmica de chama atinge um valor máximo para algumas composições da mistura do jato (figura 3).

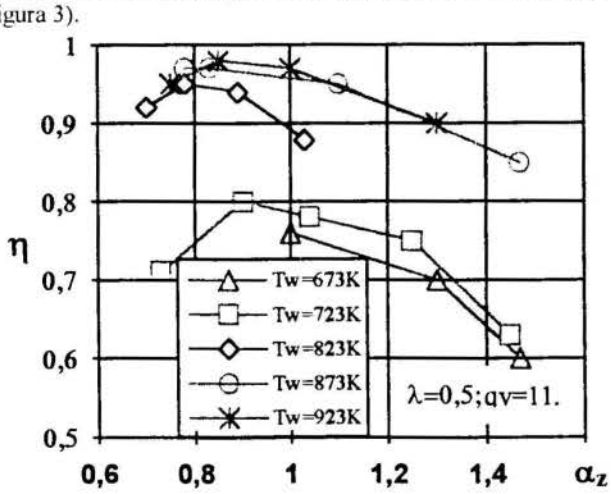


Figura 3. Influência da composição da mistura na zona de recirculação sobre o rendimento térmico.

A análise dos gases e os cálculos mostraram que o valor ótimo da composição da mistura na zona de recirculação é próximo da estequiometria. Esta particularidade se conserva para injeção do combustível diretamente na zona de recirculação (figura 4).

A análise das curvas da dinâmica de liberação do calor (figuras 5-8) permite dividir hipoteticamente a câmara de combustão em duas regiões : na 1ª região (2-3 calibres) acontece a liberação principal do calor; na 2ª região passa a queima lenta do combustível restante.

O enriquecimento da mistura do jato transversal até os valores correspondentes à composição estequiométrica na zona de recirculação (figuras 3.5) provoca o processo de combustão mais intenso na primeira região.

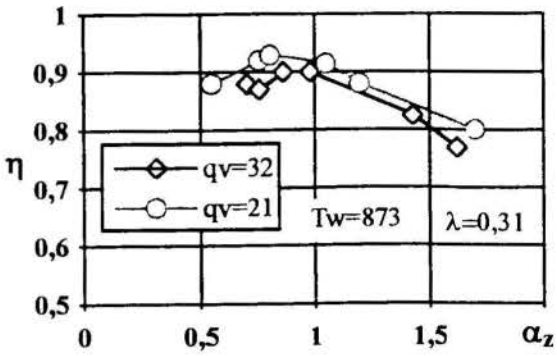


Figura 4.Influência de composição da mistura na zona de recirculação sobre o coeficiente de rendimento do calor.

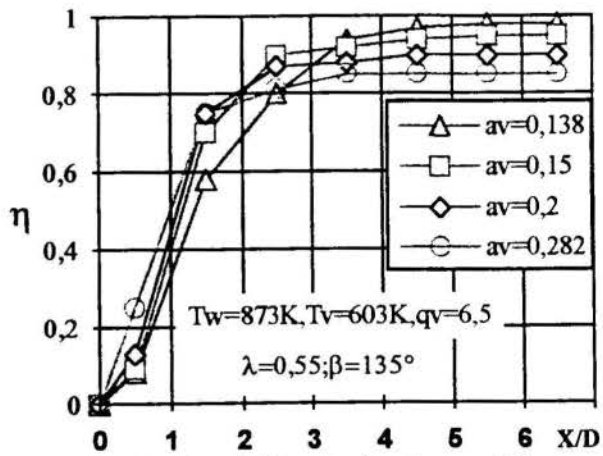


Figura 5. Dinâmica de liberação do calor para diferentes composições do jato transversal.

O aumento seguinte na injeção de combustível prolonga a primeira região, mas inicialmente o valor integral do rendimento térmico cresce até que o jato transversal atinja o valor ótimo da composição e, finalmente, decresce até o limite de estabilização.

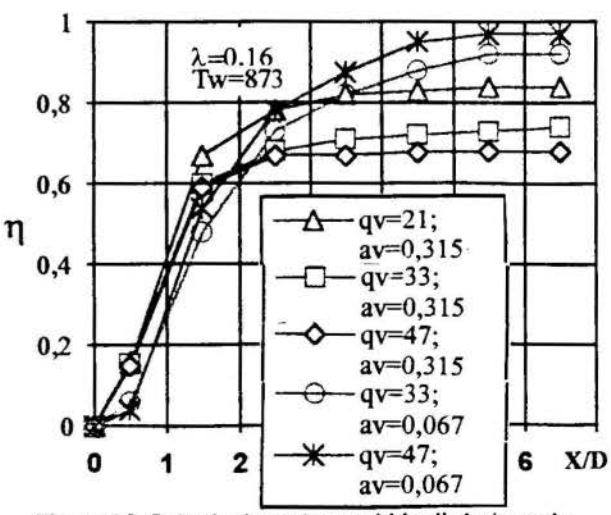


Figura 6.Influência do parâmetro hidrodinâmico e da composição do jato transversal sobre liberação do calor.

O aumento do parâmetro hidrodinâmico q_V para α_V= const (figura 6) pode provocar tanto redução de η (α_V pobres) como o aumento de η (α_V ricos). Este comportamento está relacionado com o aumento do valor do coeficiente de miscibilidade m_1, i.é, da parte do gás na zona de recirculação ejetada do fluxo principal pelo jato. Em consequência, o aumento de q_V provoca o empobrecimento da mistura na zona de recirculação, o que para $\alpha_Z > 1$ reduz η (figura 5) e para $\alpha_Z<1$ aumenta η. Para α_Z= constante, o valor η praticamente não depende de q_V.

O crescimento da temperatura inicial do fluxo principal reduz o comprimento da zona de combustão e aumenta o valor de $_1$ (figura 7).

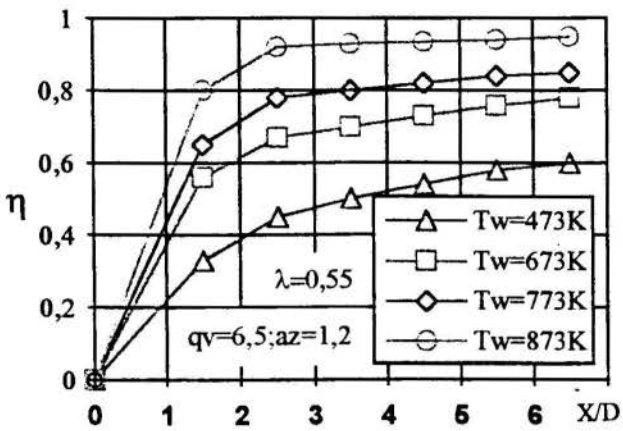


Figura 7. Liberação do calor para várias temperaturas iniciais do fluxo.

O aumento da velocidade do fluxo provoca um certo alongamento da zona de combustão (figura 8).

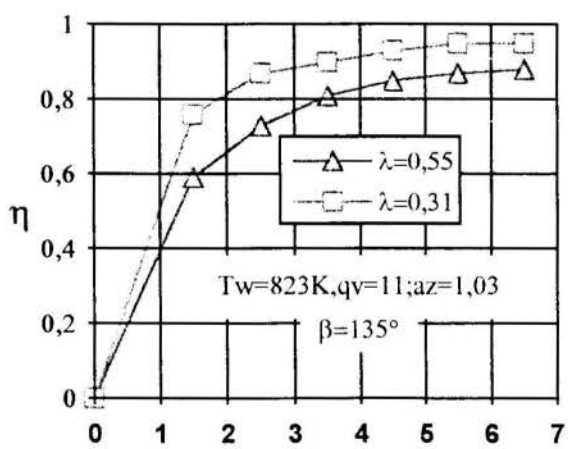


Figura 8. Liberação do calor para várias velocidades do fluxo.

Então, as influências da temperatura do fluxo principal, da sua velocidade e da composição da mistura na zona de recirculação (α_Z>1) sobre a dinâmica da liberação do calor atrás do jato transversal combustível e atrás de um estabilizador de chama mecânico (Raushenbakh et al., 1964) são iguais qualitativamente. Como foi demonstrado pelos experimentos especiais, a combustão incompleta é condicionada principalmente pela presença da mistura pobre com as características reduzidas de combustão na periferia da cúpula gasodinâmica .

O estudo da estrutura fisico-química do fluxo com combustão atrás de jato transversal anelar combustível (a distribuição das composições químicas, das velocidades e dos coeficientes locais do rendimento) permitiu estabelecer que o domínio da interação entre o jato transversal e o fluxo principal pode-se dividir em duas zonas : a primeira zona é a da mistura intensiva do jato com o fluxo que termina com rotação do jato na direção do fluxo e a segunda zona é a da mistura mais lenta do jato virado com o fluxo. Na primeira zona forma-se a mistura combustível de certa composição (α_Z) e realiza-se a sua inflamação através de produtos de combustão que enchem a zona de recirculação. Na segunda zona ocorre a liberação principal do calor, conforme leis semelhantes às de combustão das misturas homogêneas. Se a composição na zona de recirculação (α_Z) for menor que 1, então, ocorre a superposição deste processo com combustão difusiva, que termina no ponto do eixo onde α=1.

A análise dos resultados obtidos permite admitir o modelo físico do processo de liberação do calor baseado na teoria de combustão "de superfície", que leva em conta os parâmetros físico-químicos (U_n, T, P) e hidrodinâmicos (intensidade e escala da turbulência, velocidade do escoamento).

A interação entre os produtos de combustão na zona de recirculação e a mistura inicial gera um ponto inicial (a rigor , um anel) da inflamação com a frente de chama atrás dele. Segundo a literatura (Raushenbakh, 1964,Williams, 1988) este ponto é localizado na região do fluxo "direto" da zona de circulação e determina o funcionamento estável do estabilizador de chama. A mistura inicial inflama-se, passando através da frente de chama e queima-se passando por um caminho determinado pelo tempo característico de combustão e pela velocidade da mistura na linha de fluxo considerada. A posição da frente de chama determina-se pela razão entre a velocidade turbulenta de propagação de chama U_T e a velocidade da mistura inicial W no ponto considerado. À medida que ocorre o empobrecimento da mistura na direção radial, o valor da U_T muda (se α_Z <1, inicialmente U_T cresce e depois decresce; se α_Z >1, U_T decresce). Numa posição determinada (U_T << W), a propagação da chama interrompe-se. A mistura da composição mais pobre não se inflama e não participa no processo de liberação do calor.

3. MÉTODO DE CÁLCULO DA LIBERAÇÃO DE CALOR EM CONDIÇÕES NÃO UNIFORMES EM RELAÇÃO À COMPOSIÇÃO DA MISTURA INICIAL.

A análise dos campos de velocidade, de concentração e de temperatura depois da zona de interação do jato transversal e do fluxo principal (Khatchatourian, 1993) mostrou que o escoamento formado atrás da zona de recirculação é equivalente ao escoamento formado por dois fluxos coaxiais, a seguir: o fluxo interno da mesma composição com a zona de recirculação α_Z e o fluxo principal (figura 9).

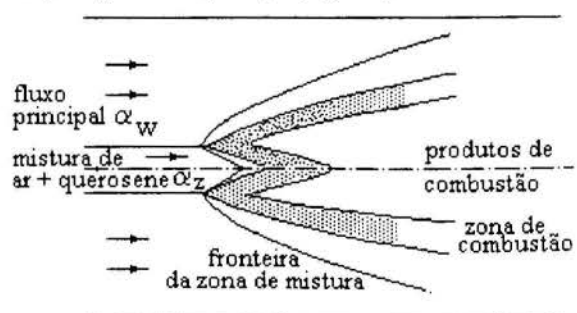


Figura 9. Esquema simplificado do processo estudado para desenvolvimento do método de cálculo.

Desprezando a diferença da densidade provocada pela variação de composição (dentro dos limites de combustão esta diferença não ultrapassa 8%), usaremos para o cálculo o sistema das equações de conservação na sua forma integral (da

massa, do momento linear , de energia) e a equação do processo adiabático para mistura inicial, (Khatchatourian et al., 1992).

Usando as relações semi-empíricas (Khatchatourian et al., 1993), foram calculados os parâmetros do fescoamento atrás do jato (sem combustão) e aplicados para o cálculo dos parâmetros de combustão que significativamente dependem da composição da mistura (figuras 10 e 11).

Através da análise dos dados experimentais da literatura obteremos as fórmulas empíricas para o cálculo da velocidade de propagação de chama e do tempo de combustão em função da temperatura, velocidade e composição da mistura inicial (para a intensidade e a escala de turbulência do fluxo em canal):

$$\frac{U_T}{W} = K_1(\alpha)\frac{T}{T_0}\cdot\left(\frac{W}{W_0}\right)^{-1/3}\cdot(1-g_p)^{3/2} \qquad (2)$$

$$t_p = K_2(\alpha)\left(\frac{W}{W_0}\right)^{-0,61}\left(\sqrt{\pi}R\right)^{0,82}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{(0,00714W-1,3314)} \qquad (3),$$

onde: $K_1(\alpha) = \frac{0,1U_T}{\left(\frac{W}{100}\right)^{0,67}}$ e $K_2(\alpha) = t_p 10^3\left(\frac{W}{100}\right)^{0,61}$ são as funções empíricas de composição da mistura inicial (ver as figuras 10 e 11); R é o raio do canal; g_p é a parte relativa dos produtos de combustão da câmara de aquecimento.

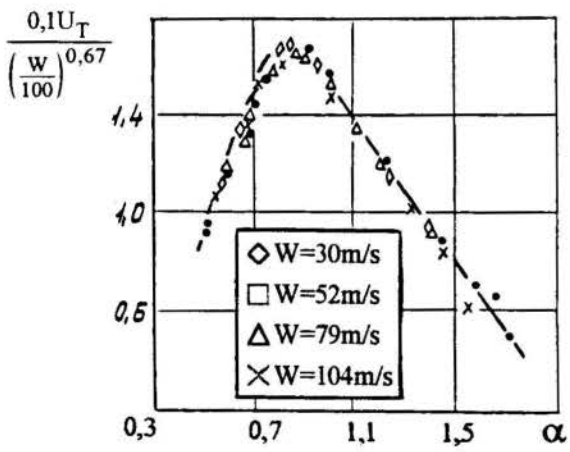


Figura 10. Velocidade generalizada de propagação de chama em escoamento turbulento (dados de Jankovski, 1970).

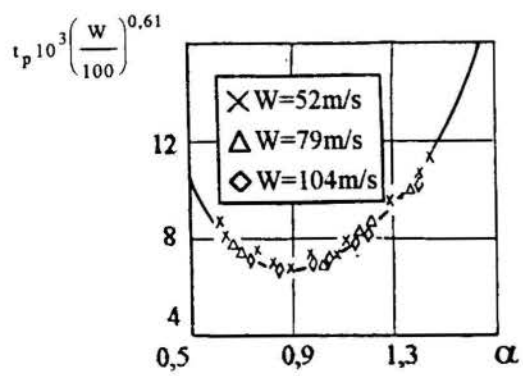


Figura 11. Tempo generalizado de combustão em escoamento turbulento (dados experimentais de Jankovski, 1970).

A interação entre o jato transversal e o fluxo principal provoca mudanças significativas das características de turbulência do escoamento e, consequentemente, dos parâmetros de combustão. Por essa razão, foram realizados experimentos especiais para medir a intensidade de turbulência (ε), espectros da frequência e as escalas médias de turbulência (l_0) do escoamento atrás de cúpula aerodinâmica (figura 12).

Os valores do componente (longitudinal) de pulsação da velocidade (W') e da escala média (l_0) obtidos com o termoanemômetro de resistência constante TPS-3 e o analisador do espectro AS-2 foram aplicados para corrigir os valores de U_T e t_p calculados pelas fórmulas (2) e (3) usando as relações semi-empíricas:

$$U_T \sim (W')^{2/3}; t_p \sim l_0^{0,82}$$

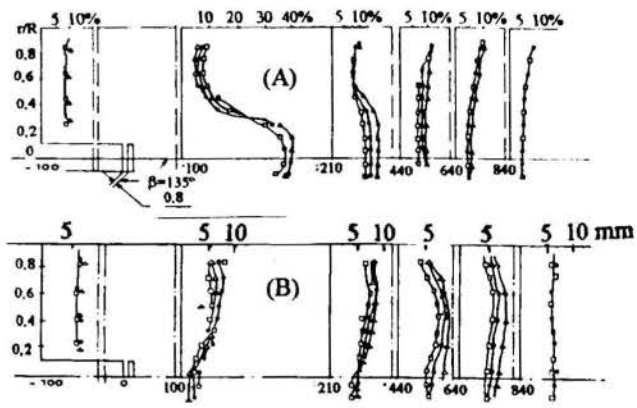


Figura 12.Campo da intensidade (A) e das escalas médias (B) de turbulência atrás do jato anelar transversal.

A figura 13 , onde está apresentada a comparação dos cálculos feitos sem esta correção (A) e com ela (B) mostra a grande influência das características de turbulência sobre o processo de combustão.

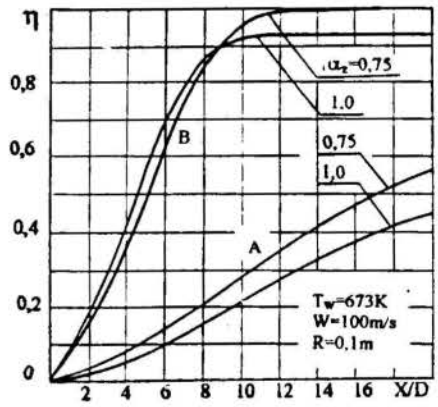


Figura 13. Cálculo da liberação do calor para condições de turbulência de canal (A) e de turbulência gerada pelo estabilizador aerodinâmico (B).

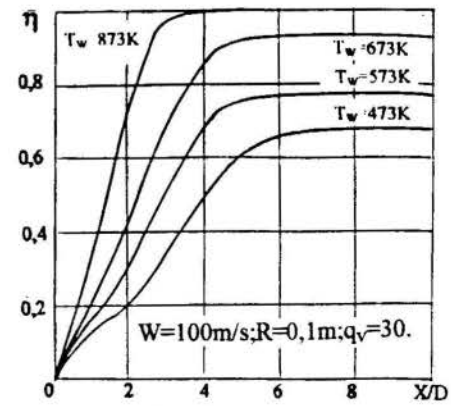


Figura 14. Liberação de calor atrás do jato para temperaturas diferentes de escoamento (cálculo).

Os resultados dos cálculos da liberação de calor com estabilização aerodinâmica da chama feitos pelo método proposto são apresentados nas figuras 14 e 15 e mostram a coincidência qualificativa satisfatória com dados experimentais.

Nas figuras 16 e 17 estão apresentados os resultados dos cálculos feitos para determinar as relações ótimas entre as composições do jato transversal e do escoamento principal conservando as vazões integrais do combustível constantes.

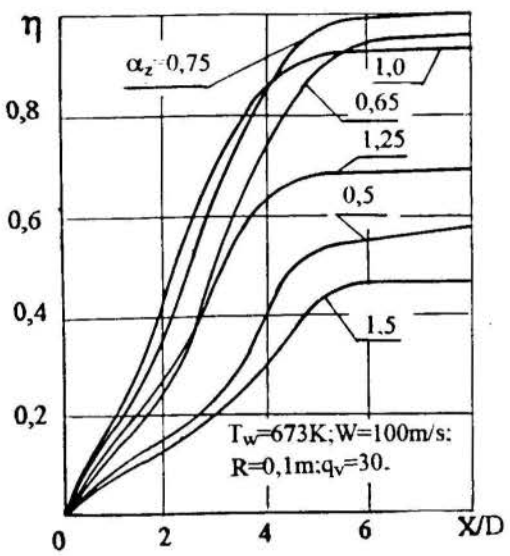


Figura 15. Liberação do calor atrás do jato transversal para composições diferentes na zona de recirculação (cálculo).

Os cálculos mostraram que para as vazões reduzidas totais de combustível (figura 17.α_Σ=3) é mais econômico fazer injeção do combustível na região ao lado do estabilizador. Para aquecimentos elevados (figura 16.α_Σ=1.5) o enriquecimento na zona central .a partir de $\alpha_z < 1$. aumenta o comprimento da câmara de combustão.

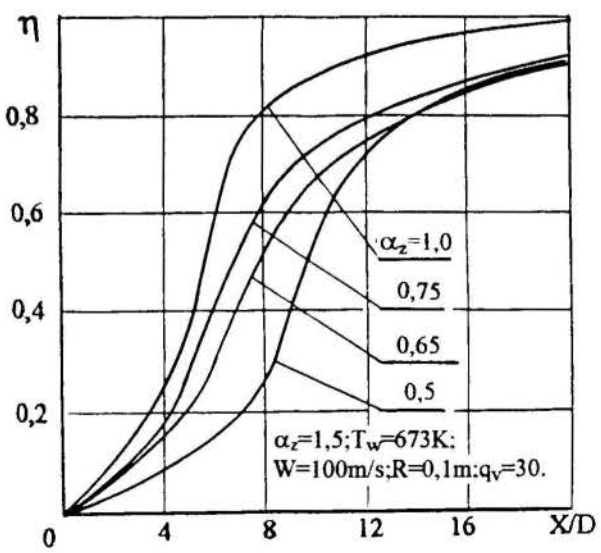


Figura 16. Liberação do calor para diferentes razões entre composições da mistura do jato e do fluxo principal (cálculo).

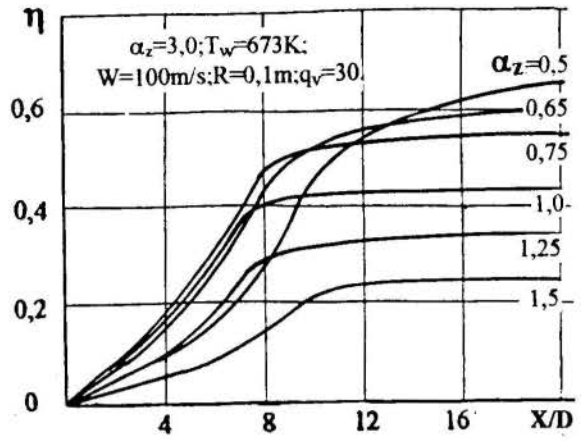


Figura 17. Liberação do calor para diferentes razões entre composições da mistura do jato e do fluxo principal.

4. ESTUDO DO PROCESSO DE COMBUSTÃO EM DOIS ESTÁGIOS.

Pode-se ver que o rendimento térmico é baixo em temperaturas reduzidas (figura 7).

A análise do modelo escolhido permite concluir que a intensificação do processo de combustão pode ser atingida pelo aumento da intensidade da turbulência **W'**, da velocidade normal de combustão $\mathbf{U_n}$ e pela redução da escala da turbulência *l*.

O aumento de **W'** pode ser conseguido através de montagem de grades especiais ou pela injeção dos jatos diante da zona de combustão (ou na zona).

Para aumentar $\mathbf{U_n}$ (P = constante e o mesmo combustível) é possível aumentar a temperatura, escolher a composição ótima ou influir na cinética química (obtenção dos "centros ativos" e etc.).

Um estabilizador que une todos os métodos mencionados da influência sobre o processo de combustão, foi elaborado e testado pelo autor (figura 18).

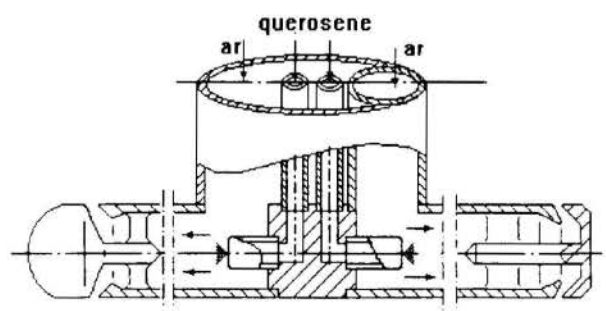


Figura 18. Esquema de um estabilizador aerodinâmico de chama com dois bocais anelares.

O processo de combustão realiza-se em dois estágios com dois jatos transversais anelares consecutivos. Ao mesmo tempo isto permite ampliar a vazão total do combustível. De fato, o estabilizador em dois estágios se apresenta como uma câmara regulável com duas zonas de combustão (primária e secundária) sem resistência aerodinâmica fora de regime de funcionamento.

A análise comparativa mostra que o rendimento térmico nestas condições é significativamente maior do que para o jato único (figura 19).

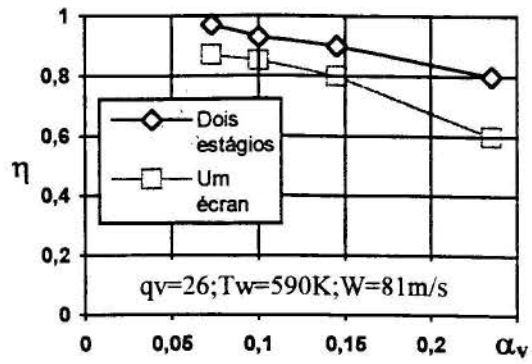


Figura 19. Rendimento térmico para estabilização de chama em um e dois estágios.

O crescimento da intensidade da luminescência observado visualmente, em comparação com o esquema de um estágio, é relacionado, provavelmente, com presença das partículas excitadas (C_2, CH, OH) na zona de combustão. O aumento do rendimento térmico nestas condições é causado, possivelmente, pela difusão dos "centros ativos" da chama na mistura inicial.

Na figura 20 mostra-se a influência do parâmetro hidrodinâmico q_v sobre η. Com o aumento de q_v, o valor de η cresce no intervalo estudado. Se o valor de q_{v1} (para α_z= constante) for conservado, então o aumento de q_{v2} provoca um acréscimo de η. O enriquecimento da mistura, em ambas zonas, aumenta η no intervalo estudado.

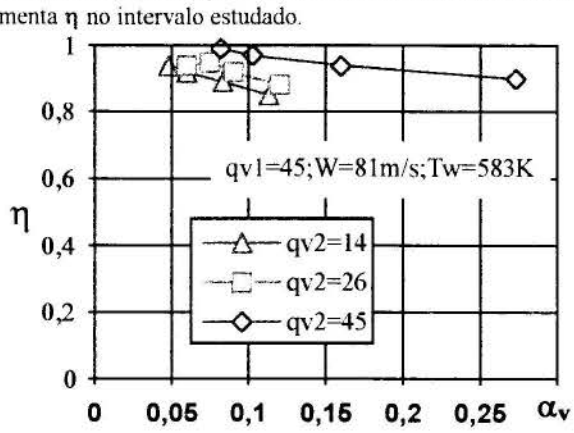


Figura 20. Rendimento térmico para estabilização de chama em dois estágios.

Desta maneira, o estudo do processo de combustão realizado em dois estágios permitiu-nos concluir:

1. O valor do rendimento térmico em condições de temperaturas baixas pode ser aumentado significativamente.

2. O aumento dos parâmetros hidrodinâmicos q_{v1} e q_{v2} provoca o crescimento de η no intervalo estudado (q_v=15-45).

3. O enriquecimento da mistura no intervalo estudado aumenta η.

CONCLUSÕES.

Neste trabalho foi realizado um estudo teórico/experimental do processo de combustão de querosene em ar em condições de estabilização aerodinâmica de chama.

Foi estabelecido que o baixo rendimento térmico para temperaturas baixas do escoamento é motivado pelo "congelamento" da combustão em regiões periféricas da câmara com concentrações reduzidas de combustível.

É proposto um método de cálculo de liberação de calor em câmara com condições não uniformes de distribuição de combustível que permite simular e otimizar o processo de combustão nestas condições.

Mostra-se que a realização do processo de combustão em duas fases permite melhorar significativamente o rendimento da combustão em temperaturas reduzidas. Foi elaborado e testado o estabilizador aerodinâmico em dois estágios.

BIBLIOGRAFIA.

Alverman W. Ulken R., 1971, "Aerodynamische Flammenstabilisierung", Experimmentelle Untersuchungen und Anwendungsmöglichkeiten. Flugwiss. 19, Helf 4.

Jankovski V.M. et al., 1970. "Metodologia de Determinação das Fronteiras de Zona de Combustão em Escoamento Turbulento", Trabalhos do Instituto de Aviação de Kazan, ser. Combustão em Escoamento Turbulento, 124, pp. 9-23. Russia.

Khatchatourian O. A., Silveira J.C.C., Salvadori F., 1992, "Método de Cálculo de Câmaras de Combustão de Escoamento Direto", ENCIT-92, IV Encontro Nacional de Ciências Térmicas, I Simpósio de Engenharia Térmica, V.1, pp.59-62, Rio-de-Janeiro, RJ-Brasil.

Khatchatourian O. A., Silveira J.C.C., Salvadori F., 1993, "Estudo Teórico / Experimental da Utilização dos Estabilizadores de Chama Aerodinâmicos em Forma de Jatos Anelares Transversais em Aplicação para Câmara Secundária de Turboreator de Dois Contornos", COBEM-93 - XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, V. 2, pp.761-764, Brasília, DF - Brasil.

Khatchatourian O. A., 1994, "Avaliação de Câmara Secundária no Sistema de um Turbo-Reator", CNMAC-94, XVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, V 2, pp.579-583, Vitória-ES, Brasil.

Raushenbakh.B.V. et ali., 1964. "Fundamentos físicos dos processos em câmaras de combustão de turboreatores", Mashinostroenie, Moscou (em russo).

Reichardt H., Ermshaus R., 1962. "Impuls und Warmeubertragung ia turbulenten Windschatten hinter Rotationskorpern", Int. J. Heat mass Transfer . 5.

Talantov A.V., Khatchatourian O..A., Gruzdev V.N., 1982, "Cálculo das câmaras de combustão de escoamento direto no computador", Editora de Instituto Superior de Aviação de Kazan, Rússia (em russo).

Talantov. A.V.,1975. "Princípios da teoria da combustão", Editora de Instituto Superior de Aviação de Kazan, Rússia (em russo).

Williams F.A., 1988. "Combustion Theory", Addison-Wesley.

ABSTRACT

In this work we present the results of a theoritical/experimental study of process of kerosene combuction in air in conditions of aerodynamic stabilization of flame. It is proposed a method to calculate the liberation of heat in a chamber with not uniform conditions of combustible distribution. We show that the realization of combustion process in two step give us a better combustion eficiency in low temperatures.In addition,we maked and tested the aerodynamic stabilizator in two probation.

ABCM

NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT DIFFUSION FLAMES USING A 4-STEP MECHANISM

Victoria Echaniz, Samantha Lodi and Eduardo Brizuela
Dep. Ing. Mecánica, Univ. Nacional de Mar del Plata, 7600 Mar del Plata - Argentina
Robert W. Bilger
Dept. of Mech. and Mechatronic Engineering, Univ. of Sydney, NSW 2006, Australia

SUMMARY

The combustion of hydrocarbons in air involves a large number of chemical reactions. To gain insight into the combustion process and for practical reasons a Reduced Reaction Scheme is used, with reaction rates determined either by kinetics or by the Eddy Break-Up theory. Results of the simulation of a turbulent, swirling, high pressure methane flame are presented and compared to experiment. Although results are satisfactory, improvements to the mixing model are needed to adequately assess and refine the chemical models.

INTRODUCTION

The combustion of hydrocarbons in air is governed by multistep mechanisms comprising one hundred or more reactions. Although it is not impossible to solve such systems, the solution process often obscures the progress of the reactions and makes it difficult to gain insights into the nature of combustion. Moreover, for practical calculations it is convenient to reduce the number of steps to a small number of significant reactions.

The method of reducing a full mechanism to a few significant reactions has been formalized (Chen,1988) and even coded for automatic generation of Reduced Reaction Schemes (RRS) (Göttgens and Terhoven, 1992). For the combustion of methane in air we have selected the scheme given by Bilger et. al. (1990).

Having selected a RRS, for nonpremixed flames, it is necessary to consider the influence of mixing on the reaction rates. Although more advanced models are being developed, the Eddy Break-Up (EBU) model (Spalding, 1971)(Magnussen and Hertjager, 1977) is still used, due to its simplicity, to give the fast chemistry limit to the reaction rates. It has been shown (Brizuela and Bilger, 1996) that a heuristic form of the EBU reaction rate can be found that has a basis in theory, and this form is used in the present computations.

Our current research task is the numerical simulation of a turbulent diffusion flame of methane in air at elevated pressures and comparison with experimental data from the literature. The purpose of the present work is to present the results pertaining to the main scalars (flow field and major chemical species), whilst work continues in computation of the minor species and refinement of the models used.

EXPERIMENT AND DATA REDUCTION

Numerical simulations are based on, and compared with, the experiments of Spadaccini et al (1976). This consisted in a jet of methane gas reacting with a coaxial swirling flow of heated air. The injector arrangement is shown in Figure 1 (adapted from Spadaccini et al, 1976); there is also a rear-facing step. The remainder of the combustor was a horizontal cylinder approximately 2.4 m long with a radius of 0.06115 m.

Several experiments were reported in the Reference, and Test 4 was selected for the present work. In this Test the turbulent diffusion flame took place at 3.8 atmospheres; the air was heated to approximately 750 K, and it had a nominal swirl velocity of 10 m/s at the inlet. Axial velocities of air and fuel were 20 and 1 m/s respectively. Figure 2 shows computed velocity vectors and streamlines to illustrate the resulting flow pattern.

Experimental data was published in numerical form, which allowed interpolation to cover the whole of the combustor in sufficient detail. Gas compositions were reported in percent mole fractions on a dry basis; this was converted to species mass fractions on a wet basis by the method detailed in the Appendix.

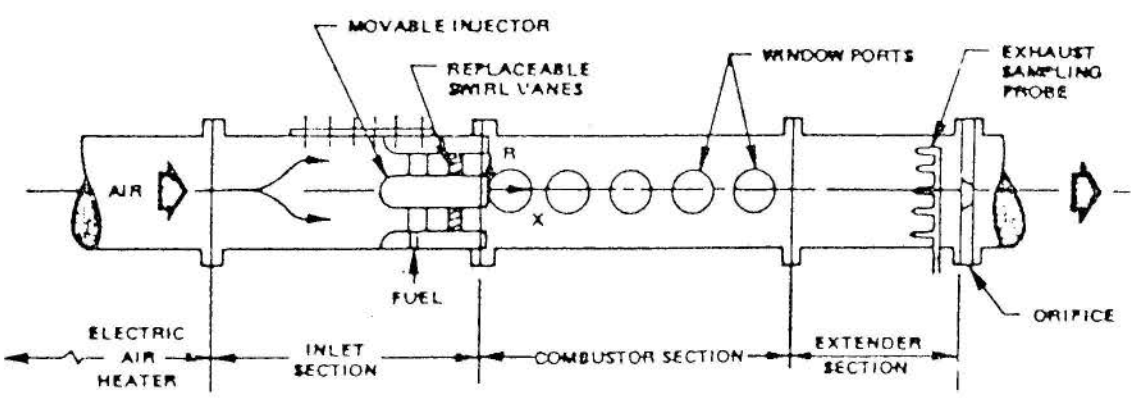


Figure 1 - Experimental burner (from Spadaccini et. al, 1976)

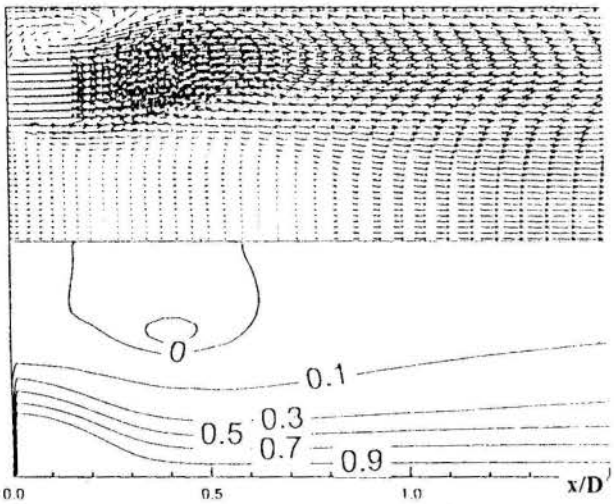


Figure 2 - Computed velocity vectors and streamlines

NUMERICAL SIMULATION

Transport Equations. Conservation of mass is computed in Favre-averaged conservative form (Favre, 1969; Bilger, 1975) as:

$$\frac{\partial r\bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \qquad (1)$$

Conservation of linear momentum and of scalars is computed in conservative, axisymmetric form in generalised coordinates (ξ,η) using the Favre-averaged general transport equation:

$$\frac{\partial}{\partial \xi}(\bar{\rho}\tilde{U}\tilde{\phi}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\bar{\rho}\tilde{V}\tilde{\phi}) = \frac{\partial}{\partial \xi}(Dq_{11}\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \xi}(Dq_{12}\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \eta}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(Dq_{21}\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \xi}) + \frac{\partial}{\partial \eta}(Dq_{22}\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial \eta}) + JS^{\phi} \qquad (2)$$

where ϕ is the quantity being transported, D the effective viscosity

$$D = \mu + \frac{\mu_t}{Sc_\phi}, \qquad (3)$$

J and q_{ij} are the metrics of the transformation of (x,r) into (ξ,η):

$$J = x_\xi r_\eta - x_\eta r_\xi \qquad (4)$$

$$q_{11} = r\frac{r_\eta r_\eta + x_\eta x_\eta}{J} \qquad (5)$$

$$q_{12} = q_{21} = -r\frac{r_\eta r_\xi + x_\eta x_\xi}{J} \qquad (6)$$

$$q_{22} = r\frac{r_\xi r_\xi + x_\xi x_\xi}{J} \qquad (7)$$

U and V are the covariant volume fluxes per unit angle

$$U = r(ur_\eta - vx_\eta) \qquad (8)$$

$$V = r(vr_\xi - ux_\xi) \qquad (9)$$

and the Schmidt / Prandtl number Sc and the source term S^{ϕ} are listed in Table 1, together with other definitions.

Boundary Conditions. Standard Dirichlet and Newmann conditions were applied at the boundaries. Logaritmic law of the wall relations were enforced for the κ-ε model at solid boundaries.

Heat removal through the water-cooled walls was simulated by means of ad-hoc sink terms in the enthalpy equation, along the solid boundaries, proportional to the temperature gradient at the wall and to the surface area. The transmission coefficient was adjusted as required to produce the observed temperature distributions along the walls.

Table 1 - Source terms and Definitions

ϕ	Sc	Source term
$\tilde{u}$	1.0	$\frac{\partial}{\partial x}\left[rD\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial r}\left[rD\left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial x}\right)\right] - r\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial x}(r\bar{\rho}\tilde{\kappa} + rD\tilde{\theta})$
$\tilde{v}$	1.0	$\frac{\partial}{\partial x}\left[rD\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial r}\right)\right] + \frac{\partial}{\partial r}\left[rD\left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r}\right)\right] - r\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} - \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}(r\bar{\rho}\tilde{\kappa} + rD\tilde{\theta}) - 2D\frac{\tilde{v}}{r} + \bar{\rho}\tilde{w}^2 + \frac{2}{3}(r\bar{\rho}\tilde{\kappa} + rD\tilde{\theta}) + 2\frac{\mu}{r}\overline{v''}$
$\tilde{w}$	1.0	$\frac{\mu_t}{Sc_w}\frac{\partial \tilde{w}}{\partial r} - \mu\frac{\tilde{w}}{r} - \bar{\rho}\tilde{v}\tilde{w}$
$\tilde{\kappa}$	1.0	$r(-\overline{u''}\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \overline{v''}\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \tilde{G} - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon})$
$\tilde{\varepsilon}$	1.3	$rC_1(-\overline{u''}\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \overline{v''}\frac{\partial \bar{p}}{\partial r} + \tilde{G})\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\kappa}} - rC_2\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{\kappa}}$
$\tilde{h}$	0.7	See text , $C_1 = 1.44, C_2 = 1.92$
$\tilde{f}$	0.7	None

Definitions

$\phi = \bar{\phi} + \phi'$ (Reynolds average) $= \tilde{\phi} + \phi''$ (Favre average)

$$\tilde{\kappa} = \widetilde{u_i''u_i''}/2$$

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\mu}{2\bar{\rho}}\left(\widetilde{S_{ij}''\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}} + \widetilde{S_{ji}''\frac{\partial u_j''}{\partial x_i}}\right)$$

$$-\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''} = \mu_t\tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\bar{\rho}\tilde{\kappa}; \ \delta_{ij} = 1 \text{ or } 0 \text{ for } i = j \text{ or } i \neq j$$

$$\mu_t = C_\mu\bar{\rho}\frac{\tilde{\kappa}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad , C_\mu = 0.09$$

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\theta$$

$$\theta = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r}$$

$$\tilde{G} = \mu_t\left[2\left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial r}\right)^2 + 2\left(\frac{\tilde{v}}{r}\right)^2 + 2\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{u}}{\partial r}\right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{w}}{\partial r} - \frac{\tilde{w}}{r}\right)^2 - \frac{2}{3}\tilde{\theta}^2\right] - \frac{2}{3}\bar{\rho}\tilde{\kappa}\tilde{\theta}$$

The Flame Model. From Bilger et. al (1991) the reduced mechanism is:

$$CH_4 + H_2O + 2H \rightarrow CO + 4H_2 \qquad \text{(I)}$$

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad \text{(II)}$$

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O \qquad \text{(III)}$$

$$3H_2 + O_2 \leftrightarrow 2H_2O + 2H \qquad \text{(IV)}$$

We compute the seven main species in this mechanism, i.e., CH_4, O_2, H_2O, CO_2, H, CO, and H_2. We also compute eight minor species implicit in this scheme (CH_3, O, HO_2, HCO, CH_3O, H_2O_2, CH_2O, OH) and the bath gas M.

The reactions rates of I-IV according to the skeletal mechanism are given in Bilger et. al (1991):

$$w_I = w_{13} + w_{18} \quad (10)$$

$$w_{II} = w_9 \quad (11)$$

$$w_{III} = w_5 - w_{10} + w_{16} - w_{20} - w_{22} + w_{24} + w_{25} \quad (12)$$

$$w_{IV} = w_1 - w_7 - w_8 + w_{10} - w_{16} + w_{18} + w_{20} - w_{24} - w_{25} \quad (13)$$

We solve Partial Differential Equations (PDE) for four main species. The remaining three main species are found by means of conserved scalars and the mixture fraction. Minor species are found by assuming steady state.

In the case of **kinetic-limited chemistry**, we solve PDE's for four main species, CH_4, O_2, H_2 and H, while H_2O, CO_2 and CO are found using conserved scalars.

From Equations I-IV the molar rates of reaction per unit volume for the four main species are:

$$w_{CH4} = -w_I \quad (14)$$

$$w_{O2} = -w_{III} - w_{IV} \quad (15)$$

$$w_{H2} = 4w_I + w_{II} - 2w_{III} - 3w_{IV} \quad (16)$$

$$w_H = -2w_I + 2w_{IV} \quad (17)$$

These rates are source terms of the PDE:

$$L(\Gamma_i) = w_i \quad (18)$$

where Γ_i is the specific abundance equal to the species mass fraction Y_i divided by the molecular mass W_i. The linear operator L applied to a general variable is:

$$L(\phi) = \bar{\rho}\frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{\rho}\,\tilde{V}\nabla\phi - \nabla\cdot(\bar{\rho}D\nabla\phi) \quad (19)$$

We generate conserved scalars by linear combinations of Equations (10) - (13), for instance :

$$\beta = \Gamma_{CH4} + \frac{1}{2}\Gamma_{H2} + \frac{1}{2}\Gamma_{H2O} + \frac{1}{4}\Gamma_H \quad (20)$$

Considering the boundary values at the fuel (stream 1) and oxidant (stream 2) boundaries, and the mixture fraction as:

$$\tilde{f} = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2} = \frac{\beta}{\Gamma_{CH4,1}} \quad (\beta_1 = \Gamma_{CH4,1};\ \beta_2 = 0) \quad (21)$$

which is rearranged to obtain:

$$\Gamma_{H2O} = 2\tilde{f}\,\Gamma_{CH4,1} - 2\,\Gamma_{CH4} - \Gamma_{H2} - \frac{1}{2}\Gamma_H \quad (22)$$

Similary we obtain CO and CO_2, using other scalars.

The remaining species, O, CH_3 and gas bath M may be calculated as detailed in Bilger et. al (1991).

For **fast chemistry conditions** we consider II in steady state which reduces the system to three steps by cancelling H between I and IV.

$$CH_4 + O_2 \rightarrow CO + H_2O + H_2 \quad (A')$$

$$H_2O + CO \rightarrow H_2 + CO_2 \quad (B')$$

$$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O \quad (C')$$

We choose to retain the CO burnout reaction II, to promote EBU rates in the rich zone, whilst reducing the system to two steps. In the EBU model it is the concentration of the deficient reactant which determines the reaction rate. In the rich zone this will be the oxidant, and Reactions (A') and (C') will have comparable EBU rates. Hence, they may be reduced to:

$$CH_4 + 2O_2 + H_2 \rightarrow CO + 3H_2O \quad (A)$$

$$H_2O + CO \rightarrow H_2 + CO_2 \quad (B)$$

Equation (A) is the sum of I, III and IV and equation (B) is II. The rates of reactions (A) and (B) will be obtained from EBU principles. The Eddy Break Up rate of the reaction between fuel F and oxidant O is computed as in Brizuela and Bilger (1996):

$$w_{EBU} = A_1\,\bar{\rho}\frac{\varepsilon}{\kappa} \quad (23)$$

where A1 is given by

$$A_1 = A^* \frac{\Gamma_{FU}}{1 + s\,\Gamma_{FU}/\Gamma_{OX}}\sqrt{s\,\Gamma_{FU}/\Gamma_{OX}} \quad (24)$$

For reaction (A), $A^*=4.0$ and

$$\Gamma_{FU} = min(\Gamma_{CH4}, \Gamma_{H2}) \quad (25)$$

$$\Gamma_{OX} = \Gamma_{O2} \quad (26)$$

$$s = 2 \quad (27)$$

and for reaction (B), $A^* = 0.4$ and

$$\Gamma_{FU} = \Gamma_{Co} \quad (28)$$

$$\Gamma_{OX} = \Gamma_{H2O} \quad (29)$$

$$s = 1 \quad (30)$$

In this case we will solve PDE's for CH_4, O_2, H_2 and CO, and H_2O, CO_2 and H will be calculated from conservation of atomic species.

To change between Kinetically- and mixing-limited chemistry we will compute the kinetic rates of reactions A and B using the results of above, i.e.:

$$w_{A,kin} = w_{I,kin} = w_{13} \quad (31)$$

$$w_{B,kin} = w_{III,kin} = w_9 \quad (32)$$

Then compute the EBU rates and then , if $w_{A,kin} > w_{A,EBU}$ and $w_{B,kin} > w_{B,EBU}$ and $w_{A,EBU} > w_{B,EBU}$ compute mixing-limited fuel and oxidant fractions by EBU methods, and compute intermediates and products using algebraic relations and scalars. If either of the kinetic rates is less than the EBU rate then compute all species using kinetic rates and conserved scalars.

Numerical Solution Procedure. The set of transport and auxiliary equations was solved numerically using a finite volume technique (Cope, 1991)(Vanka et al, 1989). In this procedure the discretised equations are solved in a co-located grid using the hybrid differencing sheme and a pressure correction equation for the continuity equation (Patankar, 1980). An axisymmetric 120x36 grid of varying fineness was used.

The solution method is decoupled: the discretised momentum and continuity equations are solved first in a multigrid scheme, yielding updated velocities and pressure; this step includes integral mass flow adjustements. Scalar equations are solved next, in the finest grid only, in the following order: swirl velocity w, turbulence quantities κ and ε, mixture fraction f and specific total stagnation enthalpy h (which includes chemical potential). The 4-step flame model is solved last, including computation of species mass fractions y_i and hence of temperature T.

Finally, mixture molecular mass, density and updated transport coefficients are computed to complete one iteration pass.

Limits. The range of solutions of the PDE's must be restricted to allowable limits (Chen and Dibble, 1991). For example, for CH_4 the maximum is the unreacted value, and the minumum is obtained setting $\Gamma_{H2} \geq 0$ in Reactions I to IV:

$$y_{max} = f \quad (33)$$

$$y_{min} = f - \frac{(1-f)\,y_{O2,2}}{2(1 + w_{III}/w_{IV})} \quad (34)$$

A model for w_{III}/w_{IV} as a function of f was not available, and a constant value of -0.2 was used on the basis of the experimental results.

For oxygen the limits are obtained setting $\Gamma_{H} \geq 0$ and $\Gamma_{H2} \geq 0$:

$$y_{max} = (1-f)\,y_{O2,2} - 2(1 + w_{III}/w_{IV})(f - y_{CH4}) \quad (35)$$

$y_{min} =$

$$(1-f)\,y_{O2,2} - \frac{2}{3}\left(4+\frac{w_{II}}{w_I}\right)\left(f - y_{CH4}\right)\left(\frac{1+\frac{w_{III}}{w_{IV}}}{1+\frac{2w_{III}}{3w_{IV}}}\right) \qquad (36)$$

These were simplified to

$$y_{min} = (1-f)\,y_{O2,2} - 4(f - y_{CH4}) \qquad (37)$$

$$y_{min} = (1-f)\,y_{O2,2} - 4f \qquad (38)$$

Limits for CO, H_2 and H were obtained in a similar manner, disregarding convection/diffusion; those for CO_2 and H_2O were deduced from the one-step reaction.

It is noted that this area has not yet received sufficient research effort, and work is continuing in determining appropriate allowable limits for these flames.

DISCUSSION AND CONCLUSIONS

This is a report of work in progress and the conclusions are perforce partial. The numerical model as a whole performed satisfactorily, and computed exhaust conditions generally agreed with experiment both in composition and flow variables, with exceptions noted below.

The system showed considerable stiffness, indicating a rigidly coupled set of reactions. The use of EBU reaction rates should have prevented or at least alleviated this problem. However, it is apparent that the turbulence model has interfered with this. Figure 3 shows computed and experimental contours of mixture fraction; it is seen that the mixing model is not satisfactory in that the gradient of mixture fraction in the primary zone is too low. This is attributable to the κ–ε model, which is known not to be adequate for flows with strong curvature of the streamline, as in the flameholding torus-shaped vortex.

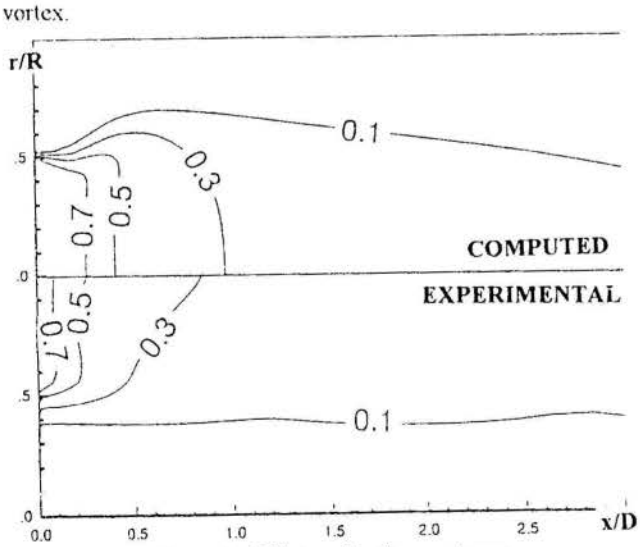


Figure 3 - Mixture fraction contours

As a consequence of low turbulent transport by the vortex, not enough oxygen reaches the primary zone, as evidenced in Figure 4. In consequence, Reaction (A), although slower than Reaction I, is almost never faster than Reaction (B), and the EBU model only operates in the shear zone at $f \approx 0.1$. This results in the observed stiffness and lower levels of CO than observed; Figures 5 and 6 compare computed and experimental CO and CO_2. Conversion of CO to CO_2 near the centreline is proceeding at kinetic rates, faster than observed. This also results in higher centreline temperatures and lower exhaust concentrations of CO.

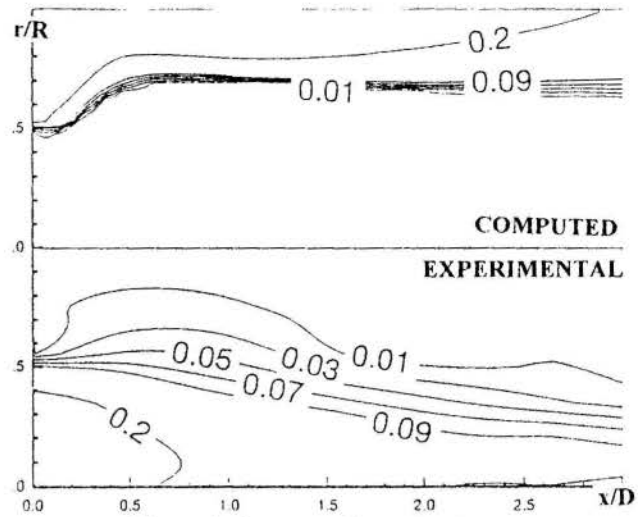


Figure 4 - Contours of mass fractions of O_2

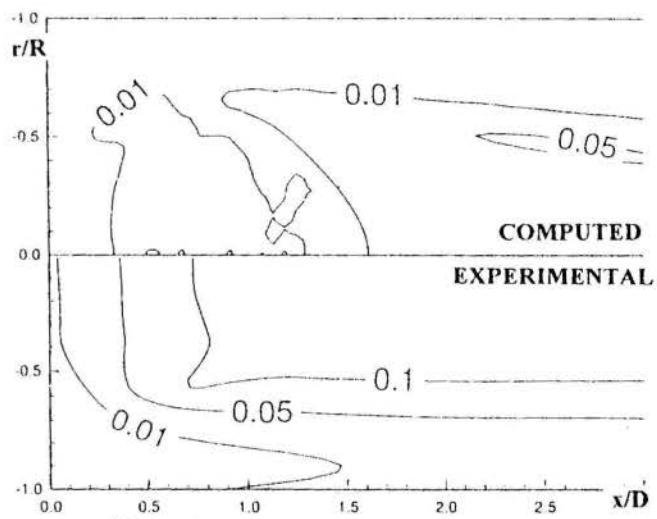


Figure 5 - Contours of mass fractions of CO

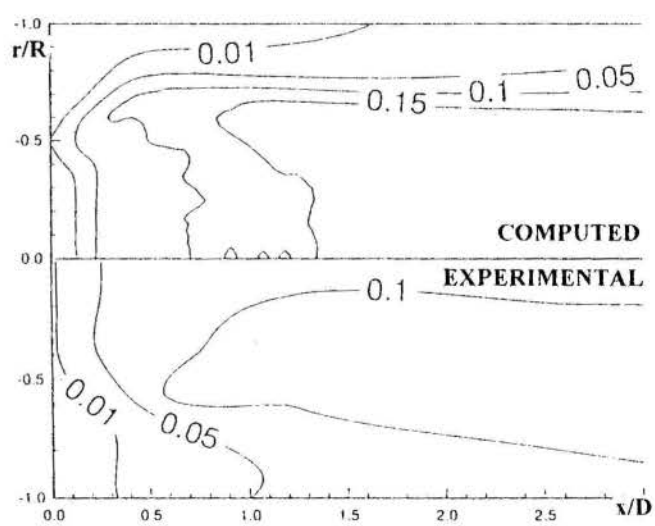


Figure 6 - Contours of mass fractions of CO_2

It is noted that step II was retained to ensure lower rates of consumption of CO (EBU rates) in the primary zone. It is hence concluded that it is necessary to improve the mixing rather than the chemical model to improve predictions along the centreline and in the primary zone.

REFERENCES

BILGER, R. W.,STARNER, S. H., and KEE, R. J., 1990; *Comb Flame* **80**, 135.

BILGER, R. W., 1975; *Combust. Sci. Technol.*, **11**, 215.

BILGER, R. W.; ESLER, M. B., and STARNER, S. H., 1991; 'On reduced mechanisms for methane-air combustion' ; Chapter 5 of 'Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames', M. D. Smooke (Editor), Lecture Notes in Physics 384, Springer-Verlag, Berlin.

BRIZUELA, E. A., and BILGER, R. W., 1996; *Combustion and Flame*, **104**, 208.

CHEN, J.-Y, 1988; *Combust. Sci. Technol.*, **88**, 89.

CHEN, J.-Y, and DIBBLE, R. W., 1991;'Application of reduced kinetic mechanisms for prediction of turbulent nonpremixed methane-air flames'; Chapter 9 of 'Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames', M. D. Smooke (Editor), Lecture Notes in Physics 384, Springer-Verlag, Berlin.

COPE, W. K., 1991; 'On the numerical simulation of turbulent flows in complex geometries; M.S. Thesis, University of Illinois, Urbana-Champaign, Department of Mechanical and Industrial Engineering.

FAVRE, A., 1969;'Statistical equations of turbulent gases'; in *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*, Society of Industrial and Applied Mathematics, pages 231-266, Philadelphia.

GÖTTGENS, J., and TERHOEVEN, P., 1992; ' RedMech, an automatic reduction program', private communication.

MAGNUSSEN, B. F., and HJERTAGER, B. H., 1977; 16th. *Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, p. 719.

PATANKAR, S. V., 1980; 'Numerical Heat Transfer anf Fluid Flow'; Hemisphere Pub. Co., New York.

SPADACCINI, L. J. ; OWEN, F. K., and BOWMAN, C. T., 1976; 'Influence on aerodynamic phenomena of pollutant formation in combustion (Phase I. Gaseous fuels)' ; Report No. EPA-600/2-76-247a, United Technology Research Centre, Connecticut.

SPALDING, D. B., 1971; 13th. *Symposium (International) on Combustion*, Pittsburgh, p. 649.

VANKA, S. P.; KRAZINSKI, J. L., and NEJAD, A. S., 1989; *AIAA Journal of Propulsion and Power*, **5**, 431.

APPENDIX

If X_{H2O} is the number of moles of water removed to yield one mole of dry mixture, the wet mole fraction of species *i* may be found as :

$$X_i = \frac{\tilde{X}_i}{1+\tilde{X}_{H2O}} \qquad \textbf{(A1)}$$

The amount of water removed may be approximated by assuming that only stable species are present and that the only hydrocarbon present is the fuel CH4. Then, the Hydrogen to Carbon ratio, which equals 4, may be also put as:

$$\frac{H}{C} = \frac{4X_{CH4}+2X_{H2O}+2X_{H2}}{X_{CH4}+X_{CO2}+X_{Co}} = \frac{4\tilde{X}_{CH4}+2\tilde{X}_{H2O}+2\tilde{X}_{H2}}{\tilde{X}_{CH4}+\tilde{X}_{CO2}+\tilde{X}_{Co}} \qquad \textbf{(A2)}$$

Hence,

$$\tilde{X}_{H2O} = 2(\tilde{X}_{CO2}+\tilde{X}_{CO}) - \tilde{X}_{H2} \qquad \textbf{(A3)}$$

The mole fractions of CO and CO_2 were reported; not so that of H_2. This was computed by assuming water-gas equilibrium so that

$$X_{H2} = K_{WG}(T)\frac{X_{H2O}X_{CO}}{X_{CO2}} \qquad \textbf{(A4)}$$

where K_{WG} is the equilibrium constant for the reaction

$$H_2 + CO_2 \leftrightarrow H_2O + CO \qquad \textbf{(A5)}$$

The constant is computed with its definition:

$$K_{WG}(T) = e^{-\Delta G^o/RT} \qquad \textbf{(A6)}$$

where the change in Gibbs free energy is given by:

$$\Delta G^o(T) = G^o_{H2O}(T)+G^o_{CO}(T) - G^o_{H2}(T) - G^o_{CO2}(T) \qquad \textbf{(A7)}$$

The Gibbs free energy for a given species as a function of temperature is obtained from standard tables.

Manipulating Equations (A3) and (A4) the moles of water may be computed as:

$$\tilde{X}_{H2O} = \frac{2(\tilde{X}_{CO2}+\tilde{X}_{CO})}{1+K_{WG}(T)\tilde{X}_{CO}/\tilde{X}_{CO2}} \qquad \textbf{(A8)}$$

Finally, the concentration of Hydrogen may be obtained from Equation (A3), and wet basis molar fractions computed using Equation (A1).

The wet basis molar fractions may be utilised to compute the mixture molecular mass:

$$W_{M-} = \sum_i X_i W_i \qquad \textbf{(A9)}$$

where W_i are the species molecular masses. This further allows computation of density:

$$\bar{\rho} \cong \frac{p\,W_M}{RT} \qquad \textbf{(A10)}$$

To compute the mixture fraction, consider the conserved scalar Zc, i.e., the mass fraction of Carbon element. Then:

$$\tilde{f} = \frac{Z_C - Z_{C,air}}{Z_{C,fuel} - Z_{C,air}} = Z_C\frac{W_{CH4}}{W_C} \qquad \textbf{(A11)}$$

The mass fraction of Carbon may be computed from:

$$Z_c = Y_{CO}\frac{W_C}{W_{CO}} + Y_{CO2}\frac{W_C}{W_{CO2}} + Y_{CH4}\frac{W_C}{W_{CH4}} \qquad \textbf{(A12)}$$

and, since $X_i = Y_i\, W_m / W_i$,

$$Z_c = \frac{W_C}{W_m}(X_{CO}+X_{CO2}+X_{CH4}) \qquad \textbf{(A13)}$$

whence

$$\tilde{f} \cong \frac{W_{CH4}}{W_m}(X_{CO}+X_{CO2}+X_{CH4}) \qquad \textbf{(A14)}$$

MODELAGEM DOS PROCESSOS EM FORNALHAS UTILIZANDO COMBUSTÍVEIS VEGETAIS PARA SECAGEM DE GRÃOS

V. Krioukov, L. Dalabrida, S. Dalepiane
Programa de Pós-Graduação (Mestrado) em Modelagem Matemática
Universidade de Ijuí
Cx. Postal: 560 CEP: 98700-000 Ijuí/RS/Br

RESUMO

Apresenta-se o modelo matemático do funcionamento da fornalha para secagem de grãos que considera o processo de combustão, o movimento dos produtos de combustão, as perdas hidráulicas e o fluxo de calor nas paredes, o aquecimento das paredes, a não-estacionaridade do escoamento em todos os canais, o fluxo de calor por radiação, a mistura com ar secundário, a influência do redemoinho e do atrito na transmissão de calor em um canal, as características reais do ventilador. Foram realizadas as pesquisas numéricas para determinar a influência de vários fatores nas características principais do funcionamento da fornalha.

INTRODUÇÃO

No Brasil e particularmente no Rio Grande do Sul, aplicam-se amplamente as fornalhas que utilizam combustível vegetal (lenha) para secagem de grãos. Como regra estas fornalhas (Fig.1) possuem várias falhas: baixo rendimento, excesso de materiais de construção, existência de fenômenos anormais, a potência do ventilador pode não corresponder ao regime preferível do funcionamento da fornalha. Estas falhas são condicionadas pela ausência dos procedimentos de projeção. Habitualmente a elaboração de nova fornalha realiza-se por via experimental e este método não permite criar a variante ótima. Mais eficiente é a metodologia da modelagem matemática, para, na base de um modelo matemático complexo dos processos termo-gaso-dinâmicos (variando: os tamanhos dos canais, as janelas, o consumo de lenha, a potência do ventilador, os esquemas de construção, etc.), escolher os regimes e os tamanhos preferíveis. Mas atualmente os modelos deste tipo e software correspondente não existem, mesmo que todos os modelos dos fenômenos separados sejam conhecidos.

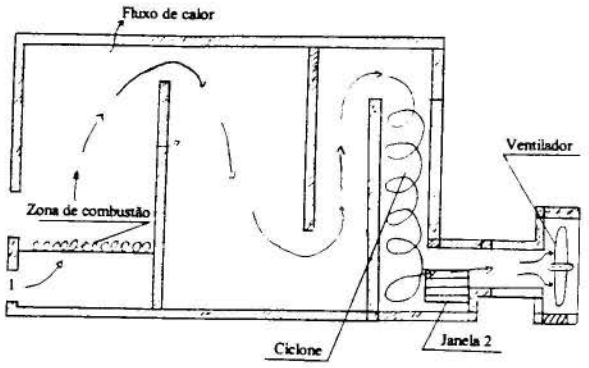


Figura 1 - Esquema da fornalha

ESQUEMA FÍSICO

Analisando a bibliografia [2, 9, 11], foi criado o esquema físico dos processos que consideram os seguintes fenômenos:
- combustão de combustível com ar na base do modelo de equilíbrio químico levando em conta várias fases condensadas;
- possibilidade da combustão tanto com $\alpha_{ox} > 1$ como $\alpha_{ox} < 1$;
- transferência de calor por radiação no primeiro canal;
- perdas hidráulicas nos canais da fornalha;
- transmissão de calor por convecção nos canais;
- aquecimento não estacionário das paredes;
- alteração da densidade do fluxo nos canais por causa da diminuição da temperatura;
- influência do redemoinho do fluxo para os processos de transferência de calor e das perdas hidráulicas (o redemoinho do fluxo é necessário para separar as partículas de fuligem);
- as características reais do ventilador (ou seja a aplicação da função $v_v = f(\Delta P_v, W)$);
- a admissão de ar secundário para conseguir a temperatura prescrita na saída da fornalha (T_S).
- o regime não-estacionario de funcionamento da fornalha

Todos os fenômenos são considerados em suas interações.

Este esquema físico é orientado para prognosticar (em dependência : do tempo, do consumo de combustível, dos parâmetros geométricos dos canais, etc), características importantes como:
- o consumo do gás quente da fornalha;
- o rendimento da fornalha;
- as perdas hidráulicas totais e em cada canal;
- o surgimento dos regimes anormais;
- o estado da temperatura das paredes do forno.

O esquema inclui algumas hipóteses simplificativas, entre elas o escoamento em todos os canais é unidimensional e quase estacionário; utiliza-se analogia de Reynolds entre os processos de atrito e da transferência de calor; não considera-se a transferência de calor ao longo das paredes; a mistura dos produtos de combustão com o ar secundário ocorre sem perdas hidráulicas; os produtos de combustão submetem-se a equação do gás ideal.

MODELO MATEMÁTICO

Criando o modelo matemático dos processos em fornalhas propomos (baseando-se nas condições reais da projeção e do funcionamento da fornalha e também nas informações apresentadas em guias) que os dados iniciais do modelo são:
- características do combustível: I_c, b_{ic} (fórmula condicional), por exemplo para lenha de eucalipto temos: $C_{4,02}H_{5,92}O_{2,80}N_{0,04}S_{0,02}$ e do ar temos $N_{5,2}O_{1,4}Ar_{0,03}$.

- informações sobre substâncias dos produtos de combustão: A_i, A_s, a_1,...a_7 (coeficientes da aproximação de propriedades):
- parâmetros geométricos dos canais da fornalha (a_i, b_i, c_i, ℓ_i);
- parâmetros geométricos das paredes (ℓ_p, H_p) e das suas propriedades (λ_p, c_p^p, ρ_p);

- características do ventilador: $\frac{V_v}{V_{nm}} = f\left(\frac{\Delta P}{\Delta P_{nm}}, W\right)$; (1)

Pode-se dividir o modelo em fragmentos:

1. Combustão e cálculo das propriedades termodinâmicas e termofisicas. Este fragmento utiliza o modelo e método [1] e contém:

a) as equações de dissociação:

$$\sum_i a_{ij} \ln P_i - \ln P_j - \ln K_j = 0 \qquad (2)$$

b) as equações de conservação dos átomos:

$$\ln\left(\sum_j a_{ij} P_j + P_i\right) - \ln M_c - \ln b_{ip} = 0 \qquad (3)$$

c) a equação de Dalton:

$$\ln\left(\sum P_q\right) - \ln P = 0 \qquad (4)$$

d) a equação de energia:

$$(I_c + \alpha_{ox} k_m^0 I_{ox}) / (1 + \alpha_{ox} k_m^0) - I_{pc} = 0 \qquad (5)$$

onde: $b_{ip} = b_{ic} + \alpha_{ox} k_0 b_{i_{ox}}$; i=1,...,n; j=1,...,m; q=1,...,(m+n); K_j=constante de dissociação da substância "j" nos átomos; P_i e P_j - são as pressões parciais das substâncias moleculares "j" e substâncias átomos "i"; a_{ij}- quantidade de átomos tipo "i" numa molécula tipo "j"; n - número de tipos de átomos; m - número de tipos de molécula; k_0, k_m^0- correlações estequiométricas molar e mássica entre o oxidante e o combustível: $\alpha_{ox} = k/k_0 = k_m / k_m^0$ - (se $\alpha_{ox} = 1$ a combustão realiza-se em condições estequiométricas); $k_m = G_{ox}/G_c$;

O sistema algébrico não-linear (2) - (5) inclui m+n+2 equações e a mesma quantidade de incógnitas: P_i, P_j, M_c, T.

Depois da resolução este sistema determina-se por dois sistemas de equações lineares:

$$\left(\frac{\partial \ln P_j}{\partial \ln z}\right) - \sum_i a_{ij} \left(\frac{\partial \ln P_i}{\partial \ln z}\right) = -\left(\frac{\partial \ln K_j}{\partial \ln z}\right) \qquad (6)$$

$$\sum_j a_{ij} P_j \left(\frac{\partial \ln P_j}{\partial \ln z}\right) + P_i \left(\frac{\partial \ln P_i}{\partial \ln z}\right) - B_i \left(\frac{\partial \ln M_c}{\partial \ln z}\right) = 0 \qquad (7)$$

onde $B_i = \sum_j a_{ij} P_j + P_i$

$$\sum_q P_q \left(\frac{\partial \ln P_q}{\partial \ln z}\right) = 0 \qquad z = P, T \qquad (8)$$

os valores das derivadas parciais:

$$\left(\frac{\partial \ln M_c}{\partial \ln T}\right), \left(\frac{\partial \ln P_j}{\partial \ln T}\right), \left(\frac{\partial \ln P_i}{\partial \ln T}\right), \left(\frac{\partial \ln M_c}{\partial \ln P}\right), \left(\frac{\partial \ln P_j}{\partial \ln P}\right), \left(\frac{\partial \ln P_i}{\partial \ln P}\right) \qquad (9)$$

Utilizando derivadas parciais (9) e P_i, P_j, M_c, T pode-se calcular: r_i; μ ; c_{pf}, c_{pq}; η e λ dos produtos de combustão.

O modelo [1] incluindo o método das "grandes moléculas" pode prognosticar a parte mássica da fase condensada.

Resumindo, pode-se escrever uma correlação para fragmento de combustão:

$$\left[\mu, r_i, T, c_p, \eta, \lambda, I\right] = F\left[b_{ic}, b_{iox}, I_c, I_{ox}, G_c, G_{ox}, P\right] \qquad (10)$$

ela significa que, sabendo-se os parâmetros da "parte direita" pode-se determinar as grandezas da "parte esquerda" dessa correlação.

2. Escoamento e transferência de calor em canais (sem radiação e redemoinho).O modelo matemático correspondente baseia-se nas equações do movimento e transferência de calor unidimensionais e não-estacionário e as condições limite:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x} + \xi\frac{u^2}{2D_{ef}} = 0 \qquad (11)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + u\frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \qquad (12)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + u\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{hB\left(T - T_p^g\right)}{A\rho c_p} = 0 \qquad (13)$$

$$\frac{\partial T_p}{\partial \tau} = \frac{\lambda p}{\rho_p c_p^p}\frac{\partial^2 T_p}{\partial y_p^2}; \qquad (14)$$

$$h\left(T - T_p^g\right) = -\lambda_p\left(\frac{\partial T}{\partial y_p}\right)_{gp}$$

$$h_a\left(T_p^a - T_a\right) = \lambda_p\left(\frac{\partial T}{\partial y_p}\right)_{ap} \qquad (15)$$

Neste sistema supõe-se que o fluxo de calor pela parede condiciona a alteração momentânea da temperatura T por toda a secção do escoamento. Observamos que a única origem do estado não-estacioário do escoamento é a mudança da temperatura T_p^g pelo tempo. Porque a expessura das paredes é grande, temos que $\frac{\partial \theta}{\partial \tau} << u\frac{\partial \theta}{\partial x}$ onde $\theta = u, \rho, T$, ou seja, as características do escoamento ao longo do canal mudam mais rápido do que a mudança destas características em qualquer seção do canal pelo tempo.

Então é possível excluir as derivadas por tempo das equações (11), (12) e (13) admitindo que a alteração T_p^g pelo tempo é conhecida. Esta alteração pode-se determinar utilizando a equação (14) admitindo que as características do escoamento no canal são conhecidas.

Neste caso as equações (11), (12) e (13) transformam-se nas equações diferenciais ordinárias e pode-se integra-las separadamente da equação (14),que por enquanto deve ser resolvida em cada secção da parede. Para diminuir o volume de cálculos admitimos um parâmetro:$S = \left(T_p^g - T_a\right)/\left(T - T_a\right)$, e supomos que S = const. ao longo de um canal e altera-se somente pelo tempo.

O parâmetro S pode-se determinar integrando a equação (14) para uma ou algumas seções da parede. A admissão S=const. aplica-se frequentemente em problemas da projeção de instalações de alta temperatura.

Finalmente leva-se em conta todas as admissões simplificadas ao sistema (11)...(15), que depois de algumas transformações matemáticas, apresentam-se nas formas:

Equação do movimento:

$$a)\frac{dP_i}{dx}=\left(\frac{f_{Ti}}{T_i}-\frac{\xi_i}{2D_{ef_i}}\right)\Bigg/\left(\frac{A_i^2P_i}{G_i^2RT_i}-\frac{1}{P_i}\right) \tag{16}$$

$$\frac{dT_i}{dx}=\frac{h_iB_i\left(1-S_i(\tau)\right)\left(T_i-T_a\right)}{G_ic_{p_i}}=-f_{T_i} \tag{17}$$

onde: $h_i=\frac{\lambda_i}{D_{ef_i}}0{,}023\,Re_i^{0,8}\,Pr_i^{0,33}$;

$$Nu_i=\frac{h_iD_{ef_i}}{\lambda_i};\quad \xi_i=\frac{8Nu_i\,Pr_i^{2/3}}{Re_i};\quad D_{ef_i}=\frac{4A_i}{B_i} \tag{18}$$

Equação do aquecimento das paredes:

$$b)\frac{\partial T_{p_i}}{\partial\tau}=\frac{\lambda_p}{\rho_pc^p}\frac{\partial^2T_{p_i}}{\partial y_i^2}; \tag{19}$$

$$h_a\left(T_p^a-T_a\right)=\lambda_p\frac{\partial T_p}{\partial y}\Big|_{y=\ell};$$

$$h_i\left(T_i^{\prime}-T_{p_i}^g\right)=-\lambda_p^i\frac{\partial T_{p_i}}{\partial y}\Big|_{y=0} \tag{20}$$

Estas equações são resolvidas separadamente para cada canal da fornalha. O parâmetro $S_i(\tau)$ muda com o tempo e por isso em cada seção do i-ésimo canal os valores P_i, T_i, alteram-se durante o tempo, ou seja, o regime do escoamento nos canais é quase estacionário. Os resultados na saída do canal anterior são os dados iniciais na entrada do canal posterior.

3. Particularidades para o escoamento de redemoinho e para transferência de calor por radiação. Nestas condições a forma principal das equações (16), (17), (18) conserva-se, mas mudam os valores dos coeficientes ξ_i, h_i.

Para o escoamento de redemoinho aplicamos o conceito "parâmetro de torção (Φ)", que determina-se pela fórmula (Mukhachev, 1991):

$$\Phi=\frac{\int_0^R wrdG}{R\int_0^R udG};\qquad dG=2\pi ru\rho dr: \tag{21}$$

Depois, pela fórmula empírica [7]:

$h_i=h_i^0\left(1+1{,}15\Phi^{1,06}\right)$, corrige-se o valor h_i^0 (o coeficiente da sessão de calor sem redemoinho). O coeficiente ξ_i corrige-se pela analogia de Reynolds.

No primeiro canal existe consideravel fluxo de calor por radiação. Este fenômeno leva-se em conta só pela correção do coeficiente "h" pela fórmula:

$$h_\Sigma=h_1+\frac{A_{gr}\varepsilon\sigma\left(T_{cv}\ 100\right)^4}{A_{sp}\left(T-T_a\right)} \tag{22}$$

4. Perdas menores. Surgem na entrada da fornalha, na saída do ultimo canal e nas passagens entre canais. As fórmulas para calcular as perdas menores são tradicionais e simples: $\Delta P_i^m=\xi_i\rho(u_i/2)$, onde o coeficiente ξ_i- determina-se em dependência das características geométricas dos lugares de conexão dos canais.

5. Mistura dos produtos de combustão com ar secundário $G_{ox}^{"}$. Este processo realiza-se para conseguir a temperatura prescrita (T_s) do gás na saída da fornalha independentemente das características (P,T,G) dos produtos de combustão na saída do ciclone. Neste fragmento do modelo é necessário determinar o consumo do $G_{ox}^{"}$ e G_s (consumo total na entrada do ventilador). É preferível a aplicação do modelo [1] ao invés da correlação do tipo:

$$G_{ox}^{"}=\frac{G_{pc}\left(c_p^{pc}T_{pc}-c_p^aT_s\right)}{c_p^sT_s-c_p^aT_a} \tag{23}$$

por que na saída do ciclone são possíveis os regimes $\alpha_{ox}^c\approx1$ até $\alpha_{ox}^c<1$. A utilização da fórmula (23) nestes regimes provocará um erro considerável. É conhecido que para o combustível e o oxidante reais (por exemplo: lenha de eucalipto + ar) a entalpia dos produtos de combustão I_{pc} é função do α_{ox} e T. Admitindo que usando o modelo [1] obtemos uma função de duas variáveis $I_{pc}=I_{pc}(\alpha_{ox},T)$. Então podemos escrever a correlação:

$$I_{pc}\left(\alpha_{ox}^e,T_{pc}\right)\left(G_c+G_{ox}^{'}\right)+I_{ox}G_{ox}^{"}=$$
$$=\left(G_c+G_{ox}^{'}+G_{ox}^{"}\right)I\left(\alpha_{ox}^s,T_s\right) \tag{24}$$

Usando a fórmula $G_{ox}^{'}=\alpha_{ox}k_m^0G_c$ recebemos a equação não-linear:

$$I_{pc}\left(\alpha_{ox}^c,T_c\right)\left(1+\alpha_{ox}^ck_m^0\right)+I_{ox}\left(\alpha_{ox}^s-\alpha_{ox}^c\right)=$$
$$=I_{pc}\left(\alpha_{ox}^s,T_s\right)\left(1+\alpha_{ox}^sk_m^0\right) \tag{25}$$

Resolvendo-a com relação a α_{ox}^s recebemos $G_{ox}^{"},G_s$. A equação (25) é certa tanto para $\alpha_{ox}^c>1$ como para $\alpha_{ox}^c\le1$.

6. Equação da adaptação dos consumos. No modelo matemático as características do ventilador apresentam-se na forma:

$$\frac{V_v}{V_{nm}}=W\sum_{i=0}^{3}a_i(\theta)^0;\quad \theta=\frac{\Delta P_v}{\Delta P_{nm}W} \tag{26}$$

onde os coeficientes a_i são conhecidos no resultado da aproximação das características reais. O consumo mássico (G_v) pelo ventilador deve ser igual ao consumo (G_s) e a diferença de pressão entre a entrada e a saída da fornalha (ΔP_s) deve ser igual ao aumento de pressão no ventilador (ΔP_v). Então pode-se escrever outra equação não-linear:

$$\frac{G_s}{\rho_sV_{nm}}=W\sum_{k=0}^{3}a_k(\theta)^k;\quad \theta=\frac{\sum_i\Delta P_i+\sum\Delta P_i^m}{\Delta P_{nm}W} \tag{27}$$

ΔP_i, ΔP_i^m - perdas hidráulicas nos canais e perdas menores são funções de muitas variáveis $T_i, u_i, \alpha_{ox}^{'}, \alpha_{ox}^{"}, G_c, G_{ox}^{'}$,

G''_{ox}, T_p etc. Para determinar as perdas é necessário aplicar os fragmentos 1,...,5 do modelo matemático complexo. Por isso a equação é muito complicada e liga as características de várias partes da fornalha. A equação (27) fecha o modelo matemático e permite determinar o valor G'_{ox} que é incógnita.

ALGORITMO DO CÁLCULO E SOFTWARE

Os passos principais do algoritmo são:

1. Depois dos cálculos iniciais escolhe-se arbitrariamente um valor G'_{ox}.
2. Determina-se a temperatura e as propriedades $c_p, I, \eta, \mu, \lambda$, para T_{pc} e temperaturas mais baixas (por exemplo T=800K).
3. A integração das equações (17) no primeiro canal determina $\Delta P_1, T_1(x)$, e perdas menores ΔP_1^m.
4. A integração das equações (17) para outros canais, incluindo o ciclone, até a zona de mistura com o ar secundário determina $\Delta P_i, T_i(x)$ e ΔP_i^m.
5. A determinação das características do gás depois da mistura: $\alpha_{ox}^s, G_s, c_p, \lambda, \eta, \mu$.
6. A integração das equações (17) para o último canal determina $\Delta P_n, T_n(x)$ e ΔP_n^m.
7. O cálculo de ΔP_Σ e G_v; e a comparação de G_v com G_s. Se a diferença entre eles é maior que a admissível, realiza-se a correção do G'_{ox} e retorna ao item 2.
8. A resolução da equação (19) para algumas áreas das paredes de cada canal determina os parâmetros S_i.

Se o regime do trabalho aproxima-se das condições anormais ($\alpha_{ox} \leq 1$) é necessário escolher uma das quatro possibilidades:

- terminar o cálculo;
- diminuir o consumo da lenha;
- aumentar taxa de potência do ventilador;
- continuar o cálculo sem mudanças.

9. Se $\tau \leq \tau_f$ (τ_f - tempo de funcionamento da fornalha) retorna ao item 2.
10. Terminar o cálculo.

De acordo com o algoritmo citado foi realizado o software (em linguagem C^{++}). No processo do cálculo é possível fazer a correção do consumo de lenha ou da potência do ventilador, para evitar os regimes anormais do funcionamento da fornalha. O software possui várias variantes para a impressão de resultados e as comunicações diagnósticas.

PESQUISAS NUMÉRICAS

Para realizar as primeiras variantes de cálculo foram escolhidos os dados iniciais que correspondem aos parâmetros e regimes de fornalha típica de secagem de grãos. A fornalha possui 5 canais com as áreas (A_i) e os comprimentos indicados na tabela seguinte:

canal	1	2	3	4	5	grelha
$A_i\,(m^2)$	0,7	0,7	0,1	0,1	1,5	0,7
$\ell_i\,(m)$	1,2	1,2	1,0	1,0	2	-

No início do canal 1 fica a grelha onde realiza-se o processo de combustão. No canal 4 há um redemoinho para separar as partículas. Entre os canais 4 e 5 fica a janela 2 e a câmara de mistura para conseguir (controlando o consumo de ar secundário) T_m = const. Para calcular o fluxo por radiação propõe-se que a temperatura do carvão na grelha seja de 2000K. A característica do ventilador imita-se pela fórmula:

$$\frac{V_v}{V_{nm}} = W\left(1 - \frac{\Delta P}{\Delta P_{nm} W}\right)$$

O combustível caracteriza-se pela fórmula condicional $C_{4,02}H_{5,92}O_{2,80}N_{0,04}S_{0,02}$ e entalpia -4123kJ/kg.

Na figura 2 está apresentada a distribuição dos parâmetros principais pelos canais no início ($\tau = 0$) e no término ($\tau = 4h$) do trabalho da fornalha.

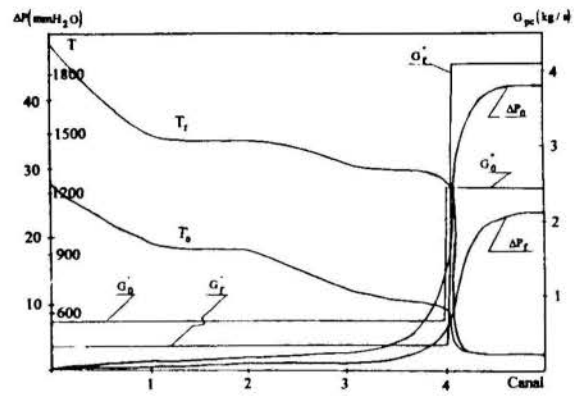


Figura 2 - Variação de pressão, consumo e temperatura dos produtos de combustão ao longo do canal.

As grandezas de seu controle são: G_c = 0,045kg/s; W = 1; T_s = 400K. Ao longo dos canais P e T diminuem pelas perdas hidráulicas e os fluxos de calor. A pressão diminui principalmente depois do canal 4 e a temperatura diminui em duas zonas: no canal 1 (por causa do grande fluxo de calor por radiação) e na camara de mistura (a mistura com o ar secundário). Ao longo dos canais 1,...,4 os valores $\alpha_{ox} = \alpha'_{ox}$ e $G_{pc} = G'$ não mudam e determinam-se somente pelos consumos do combustível e do ar da janela 1. Mas na câmara de mistura estes valores alteram-se ($\alpha_{ox} = \alpha_{ox}^s$, $G_{pc} = G_s$) "por salto".

À medida que as temperaturas das paredes (T_p) aumentam os fluxos caloríficos do escoamento em canais para as paredes diminuem. Por isso na saída do canal 4 aumenta a entalpia do escoamento e é necessário aumentar o consumo de ar secundário para conseguir a temperatura prescrita (T_s). Portanto, se $G''_f > G_0$ o ventilador vai reagir a esta mudança para diminuir ΔP_v (porque W = const.). Para diminuir ΔP_Σ (que deve ser igual ΔP_v) o escoamento adaptando-se diminui o consumo de ar através da janela 1 e consequentemente α'_{ox}. Por isso $\alpha'_{ox_0} > \alpha'_{ox_f}$ e (T_{pc}) aumenta $T_{pc}^f > T_{pc}^0$ por que a combustão realiza-se na fornalha quando $\alpha_{ox} > 1$ (no caso contrário surge um regime anormal).

A influência do consumo de combustível nas características da fornalha é mostrado nas figura 3, 4 e 5 (G_c = (0.035,...,0.045)kg/s = var; W = 1; T_s = 400K)

Com a diminuição de G_c diminui-se a quantidade de calor em escoamento na saída do canal 4 (independente do consumo de ar da janela 1), por isso diminui-se a quantidade de ar secundário (para conseguir T_s) e o consumo G''_{ox}. Neste caso o

ventilador deve aumentar ΔP_v. O escoamento "reagindo" a esta mudança aumenta ΔP_Σ e o consumo de ar G'_{ox} na janela 1.

O crescimento de α'_{ox} é a causa principal da diminuição de T_{pc} com a diminuição da G_c. Observamos que o rendimento diminui com a diminuição de G_c por causa da existência de fluxo considerável de calor por radiação (no canal 1).

A influência da T_s nas características da fornalha é apresentado nas figuras 6, 7 e 8 ($G_c = 0.045 kg/s$, $W = 1$, $T_s(var) = 400,...,440K$).

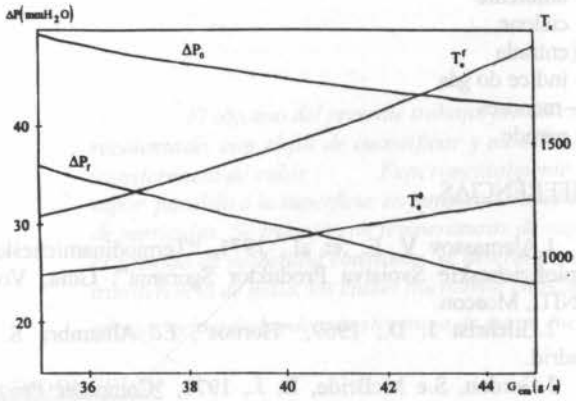


Figura 3 - Influência do consumo de combustível na temperatura e diferença de pressão

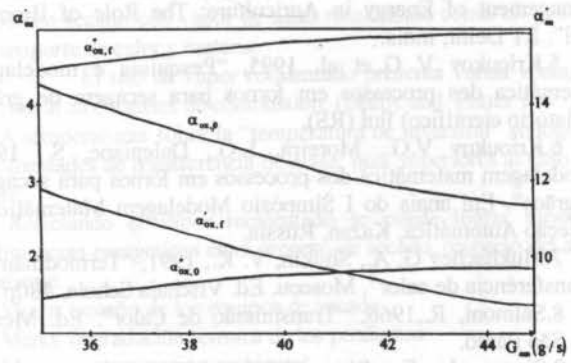


Figura 4 - Influência de consumo de combustível nos coeficientes α'_{ox} e α''_{ox}.

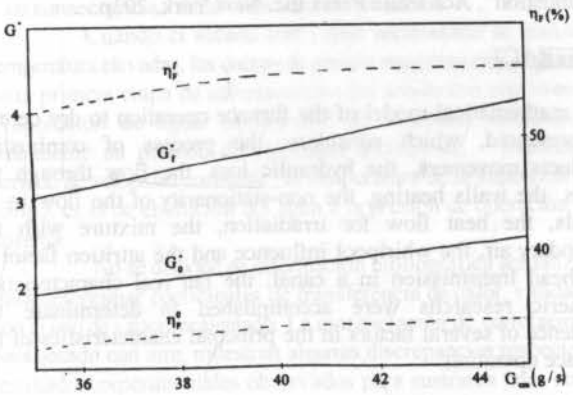


Figura 5 - Influência do consumo de combustível no consumo do ar quente e no rendimento

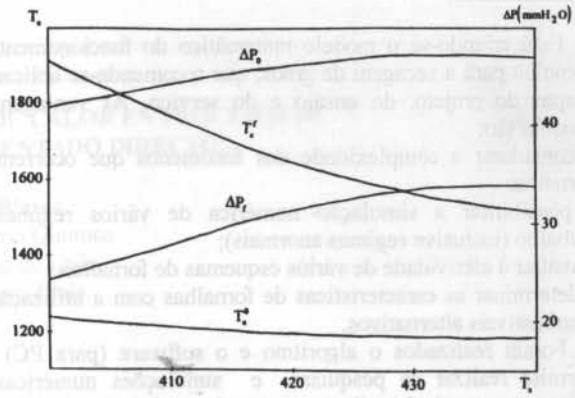


Figura 6 - Influência da temperatura do ar quente na temperatura da combustão e na diferença de pressão.

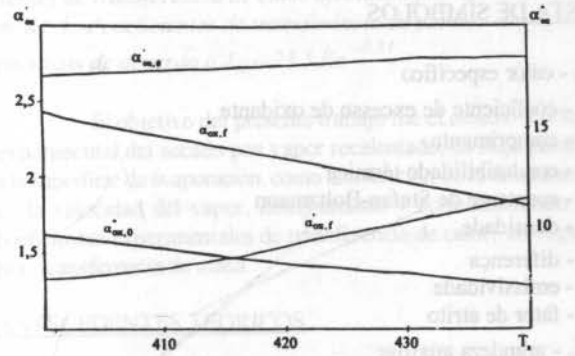


Figura 7 - Influência da temperatura do ar quente sobre coeficientes α'_{ox} e α''_{ox}

É evidente que o aumento da T_s diminui o consumo G''_{ox} e portanto α''_{ox}, porque é necessário o consumo menor de ar secundário. Neste caso aumenta-se ΔP_v e portanto ΔP_Σ que aumenta α'_{ox} e diminui T_{pc} tanto no início como no término do funcionamento da fornalha. Observamos que a diminuição G''_{ox} é mais considerável (~25%) que o aumento da T_s (~10%).

Este trabalho realizou-se com o apoio do CNPq e da empresa "Kepler Weber".

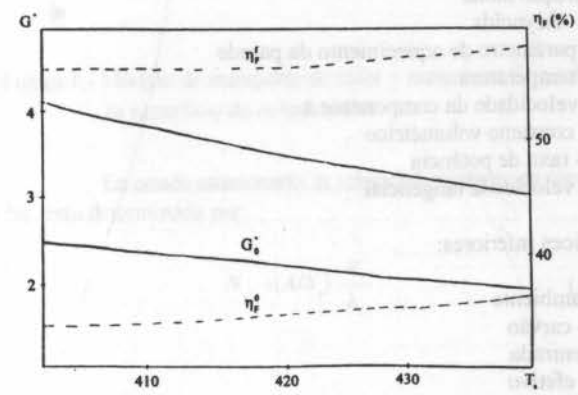


Figura 8 - Influência da temperatura do ar quente sobre o seu consumo e rendimento da fornalha.

CONCLUSÃO

1. Está criando-se o modelo matemático do funcionamento de fornalha para a secagem de grãos, que recomenda-se aplicar nas etapas do projeto, do ensaio e do serviço. As vantagens do modelo são:
- considerar a complexidade dos fenômenos que ocorrem em fornalha:
- possibilitar a simulação numérica de vários regimes de trabalho (inclusive regimes anormais);
- avaliar a efetividade de vários esquemas de fornalhas:
- determinar as características de fornalhas com a utilização de combustíveis alternativos.

2. Foram realizados o algoritmo e o software (para PC) que permite realizar as pesquisas e simulações numéricas do funcionamento da fornalha no regime interativo.

3. Foram executados os cálculos numéricos das dependências das características de alguns fatores dirigidos que mostraram a capacidade de trabalho do modelo e software. Os resultados, por enquanto, são preliminares mas não contém contradições inexplicáveis do ponto de vista dos fenômenos de transporte e da físico-química.

LISTA DE SÍMBOLOS

c_p - calor específico
α - coeficiente de excesso de oxidante
ℓ - comprimento
λ - condutibilidade térmica
σ - constante de Stefan-Boltzmann
ρ - densidade
Δ - diferença
ε - emissividade
ξ - fator de atrito
M_c - grandeza auxiliar
μ - massa molecular
Φ - parâmtero de torção
τ - tempo
η - viscosidade
A - área
B - perímetro
D - diâmetro
G - consumo
H - altura
h - coeficiente de transmissão de calor
I - entalpia
K - constante de dissociação
Nu - Nussel
P - pressão
Pr - Prandtl
R - constante do gás / raio do canal
r - fração molar
Re - Reynolds
S - parâmetro de aquecimento da parede
T - temperatura
u - velocidade da componente x
V - consumo volumétrico
W - taxa de potência
w - velocidade tangencial

Índices inferiores:

a - ambiente
cv - carvão
e - entrada
ef - efetivo
f - frio / final
g - índice do gás
gr - grelha
nm - nominal
ox - oxidante
p - parede
pc - produtos de combustão
q - equilibrado
s - saída
sp - superfície do canal
v - ventilador

Índices superiores
' - inicial
" - secundário
a - ambiente
c - ciclone
e - entrada
g - índice do gás
m - menores
p - parede

REFERÊNCIAS

1.Alemassov V. E. ,et al., 1971, "Termodinamicheskie e Teplofizicheskie Svoistva Produktor Sgorania". Guia, Vol 1, VINITI, Moscou.

2.Gilchrist J. D., 1969, "Hornos", Ed Alhambra S. A., Madrid.

3.Gordon, S.e McBride, B. J., 1971, "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations", NASA, Lewis Research Center, Washington, 245p.

4.Jenkins, B. M.,1990, "Fuel Properties for Biomass Materials. International Symposium on Application and Menagement of Energy in Agriculture: The Role of Biomass Fuel". IIT Delhi, India.

5.Krioukov V G.,et al. 1995, "Pesquisas e modelagem matemática dos processos em fornos para secagem de grão". (Relatório científico) Ijuí (RS).

6.Krioukov V.G., Moreira, L.G., Dalepiane, S., 1995, "Modelagem matemática dos processos em fornos para secagem de grãos". Em anais do I Simpósio Modelagem Matemática e Projeção Automática, Kazan, Rússia.

7.Mukhachev G. A., Shukin, V. K., 1991, "Termodinâmica e transferência de calor". Moscou, Ed. Vischaia Schola, 480p.

8.Salmoni, R.,1966, "Transmissão de Calor". Ed. Mester Jou, São Paulo.

9.Sisson, L. E., Pitts, D. R., 1988, "Fenômenos de Transporte". Guanabara, Rio de Janeiro.

10.Spilimbergo, A. P., Auth, C. J. M., Iskhacova, R. L., 1995,"Propriedades dos produtos de combustão dos combustíveis vegetais". COBEM-CIDIM, Belo Horizonte, MG.

11.Tillman, D. A.; Rossi, A. J.; Kitto, W. D., 1981, "Wood Combustion", Academic Press Inc. New York, 203p.

ABSTRACT

The mathematical model of the furnace operation to dry cereals is presented, which considers: the process of combustion products movement, the hydraulic loss, the flow through the walls, the walls heating, the non-stationarity of the flow in all canals, the heat flow for irradiation, the mixture with the secondary air, the whirlpool influence and the attrition factor in the head transmission in a canal, the fan real characteristics. Numeric researchs were accomplished to determinate the influence of several factors in the principal characteristics of the furnace operation.

COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN PROCESOS DE SECADO CON VAPOR RECALENTADO DIRECTO.

P.I. Alvarez, . R. Blasco.
Departamento de Ingeniería Química
Universidad de Santiago de Chile
Casilla 10233. Santiago- Chile.

RESUMEN

El objetivo del presente trabajo, fué un estudio teórico y experimental del secado de arenas con vapor recalentado, con el fin de cuantificar y modelar los efectos de transferencia de masa sobre el coeficiente de transferencia de calor. Experimentalmente se determinaron las curvas de secado de arena con flujo de vapor paralelo a la superficie, en función de la temperatura, velocidad del vapor recalentado y espesor del lecho de partículas. Se trabajó con temperaturas de vapor entre 200ºC y 300ºC, velocidades de 1, 2 y 3 [m s]. Para el periodo de velocidad constante, se determinaron los coeficientes de transferencia de calor afectados por la transferencia de masa, los cuales fluctuaron entre 68 y 150 [W m²K]. Los coeficientes de transferencia de calor a bajas velocidades de transferencia de masa, fueron correlacionados de acuerdo a $J_H = 23.5\ Re^{-0.51}$.

INTRODUCCION

Como una manera de optimizar el uso de la energía y mejorar calidad del producto, resulta interesante el estudio del uso de vapor recalentado como reemplazo del aire en los procesos de secado. Plantas pilotos y procesos industriales tales como secado de remolacha, de pulpa de papel, harinas de pescado, etc. ya utilizan secado con vapor de agua recalentado como un gas de transporte de calor y materia.

El uso de vapor recalentado presenta varias ventajas frente al aire o gases de combustión, (Beeby and Potter 1985):

- A temperaturas sobre la "temperatura de inversión" se logran velocidades de transferencia de masa, muy superiores al caso de aire.
- Reciclando el vapor recalentado se puede lograr mejores eficiencias energéticas en el proceso de secado, respecto del aire caliente.
- Menor tamaño de los equipos de secado
- Menor degradación térmica de los productos.
- Menor contaminación ambiental

En el secado con vapor sobrecalentado directo, el calor necesario para la evaporación del agua se transfiere a través de un film de vapor, sin resistencias difusionales al transporte de humedad desde la superficie de evaporación , lo que se traduce en un aumento de los coeficientes de transferencia de calor y de masa y en consecuencia, de la velocidad de secado.

Cuando el secado con vapor recalentado se realiza a temperatura elevadas, las curvas de secado muestran tres periodos: -una primera etapa de calentamiento del solido con una mínima evaporación de agua, un periodo de velocidad constante y finalmente un periodo de velocidad decreciente. Durante el período de velocidad constante , la temperatura de la superficie del sólido, es la de ebullición del agua a la presión de operación del sistema.

No se dispone de información bibliográfica actualizada para determinar coeficientes de transferencia de calor, validados con el uso de vapor recalentado. La extrapolación de correlaciones para secado con aire, muestran algunas discrepancias respecto de resultados experimentales observados para sustratos tales como harinas, producto de los efectos que genera la elevada velocidad de evaporación sobre los coeficientes de transferencia de calor.

El objetivo del presente trabajo fue el estudio teórico y experimental del secado con vapor recalentado, en flujo paralelo a la superficie de evaporación, como una función de la temperatura y la velocidad del vapor, determinando y correlacionando los coeficientes experimentales de transferencia de calor, corregidos por transferencia de masa.

ANTECEDENTES TEORICOS

Se determinarán los balances de masa y energía en el film adyacente sobre la superficie de secado. (figura 1).

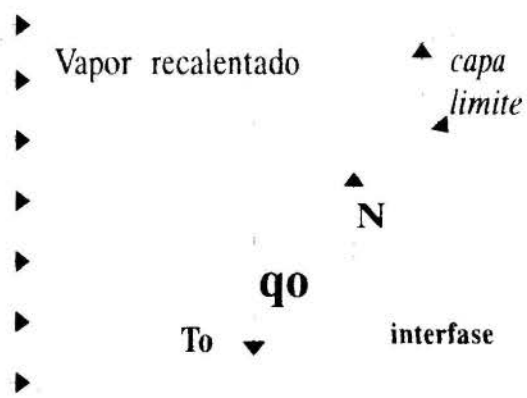


Figura 1.- Modelo de transporte de calor y materia en film sobre la superficie de evaporación.

En estado estacionario, la velocidad constante de secado, Nc, esta determinada por:

$$N_c = (A/S_s)\ \frac{q_{vo}}{\lambda_{vo}} \qquad (1)$$

donde q_{vo} corresponde al calor transferido sobre la masa Ss de sólido seco, que expone un area (A) al proceso de secado. El calor

latente de vaporización λ_o está evaluado a la temperatura de la superficie del lecho.

Adicionalmente la dinámica de transferencia de calor es función de un coeficiente de transferencia (h*), válido para elevadas dinámicas de transferencia de calor y de un potencial de temperaturas entre la superficie del lecho T_o y la del vapor recalentado T_h (Bird et al. 1960)

$$q_o = h^* (T_h - T_o) = h\, \theta_T (T_h - T_o) \qquad (2)$$

donde el factor de corrección por transferencia de masa θ_T corresponde a la relación entre los coeficientes de transferencia de calor:

$$\theta_T = h^*/h \qquad (3)$$

siendo h es el coeficiente de transferencia de calor válido para bajas velocidades de transferencia de masa.

De acuerdo a la teoría de película y a partir de las ecuaciones de variación, resolviendo el sistema clásico dado por Bird (1960) en que vapor de agua difunde en aire, se obtiene el factor de corrección, en función del parámetro R_T (relación de densidad de flujos):

$$\theta_T = \frac{Ln(1 + R_T)}{R_T} \qquad (4)$$

en que R_T está definido por la ecuación:

$$R_T = \frac{C_{pv}(T_h - T_o)}{\lambda_o} \qquad (5)$$

Reordenando ecuaciones, se puede finalmente obtener el coeficiente h válido para bajas velocidades de transferencia de masa, de la forma:

$$h = \frac{N_o}{(T_h - T_o)} \frac{S_s}{A} \lambda_o \frac{R_T}{Ln(1 + R_T)} \qquad (6)$$

Adicionalmente la dependencia de las propiedades físicas del vapor recalentado con la temperatura, fué correlacionada por Das (1985) y permite trabajar las propiedades del gas en la capa límite con las propiedades del seno de la fase gaseosa. El coeficiente h*, referido a la temperatura del seno del vapor, se relaciona con el coeficiente h por:

$$h = h^* \theta_h \qquad (7)$$

donde el parámetro de corrección θ_h se define por:

$$\theta_h = (T_h/T_o)^{-0,77} \qquad (8)$$

De esta forma la velocidad de secado constante está relacionada con el coeficiente de transferencia de calor a bajas velocidades de transferencia por:

$$N_o = \frac{(T_h - T_o)}{\lambda_o} \frac{Ln(1 + R_T)}{R_T} \left(\frac{T_h}{T_o}\right)^{-0,77} h \qquad (9)$$

El coeficiente h* puede ser correlacionado en función del número Prandt y de Reynolds, en función de parámetros a y n, de la forma

$$J_H = \frac{h}{G\, C_{pv}} Pr^{2/3} = a Re^{n} \qquad (10)$$

EQUIPOS Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

El equipo experimental está constituido por una cámara de secado de sección rectangular, adecuadamente aislada, por la que fluye vapor recalentado en forma paralela a la superficie de evaporación de un contenedor interno. El sistema utiliza un recalentador eléctrico de 5 Kw provisto de sistemas de control, lo que asegura la estabilidad de la temperatura del vapor. Esta fué continuamente monitoreada por una unidad de adquisición de datos OPTO22. La dinámica de secado de las muestras fué determinada gravimétricamente, para lo cual se utilizó una balanza de alta precisión instalada dentro del equipo de secado, en una cámara presurizada con aire, unida a un contenedor de la muestra húmeda (figura 2). El material a secar, (arenas tipo Carenit), previamente tamizadas, fueron acondicionadas a humedades iniciales sobre el 40% b.s. a fin de asegurar un adecuado periodo de secado bajo condiciones de velocidad constante.

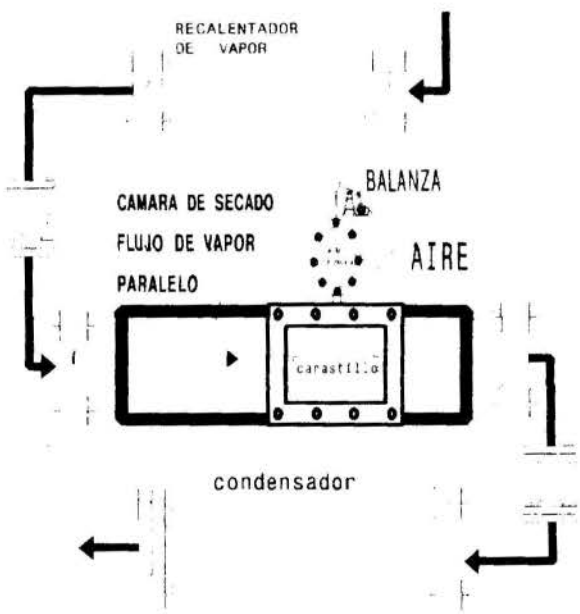


Figura 2. Esquema del equipo de secado con vapor recalentado.

La muestra de arena fué ubicada en un pequeño canastillo, de dimensiones 0.11 m por 0.055 m y espesores de lecho desde 1.5 cm hasta 3 cm, adecuadamente aislado a fin de evitar los efectos conductivos de calor sobre la velocidad de evaporación. El conjunto fué suspendido desde la balanza.

Para determinar las condiciones de flujo de vapor recalentado en la cámara de secado, se midieron las presiones y temperaturas interiores así como también la masa del vapor circulante, utilizando un condensador multitubular de gran superficie de intercambio.

Las características físicas de las arenas utilizadas en las

corridas experimentales se muestran en la tabla I.

Tabla I. Arenas tipo Carenit usadas en experiencias de secado con vapor recalentado.

Tipo de arena.	Tamaño particulas	Densidad aparente	Porosidad experimental
C - 5	1.6 0 - 3.4	1.48	0.41
C - 6	0.85 - 1.0	1.48	0.405
C - 7	0.55 - 0.65	1.545	0.375
C - 8	0.35 - 0.45	1.52	0.365

Las diferentes corridas experimentales fueron realizadas con temperaturas de vapor de 200, 250 y 300°C, velocidades del vapor de 1, 2 y 3 m/s, para distintas granulometrias de arena y espesores de lecho.

ANALISIS Y DISCUSION DE LOS RESULTADOS

La figura 3 muestra las curvas típicas de secado, para 3 niveles de temperatura del vapor recalentado , a velocidad del vapor constante:

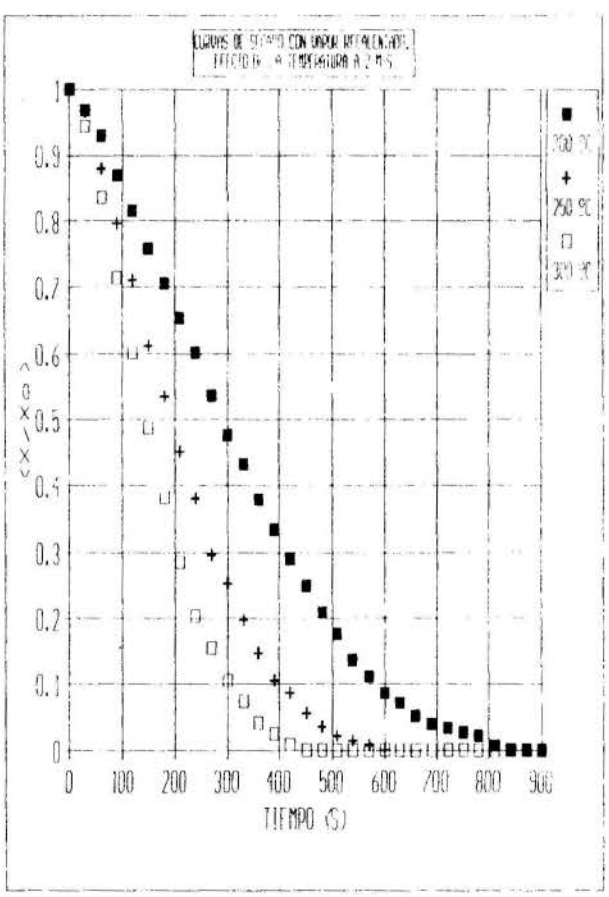


Figura 3.- Perfiles adimensionales de humedad de arena vs. tiempos para diferentes temperaturas del vapor recalentado.

La figura 4 muestra las curvas de secado para tres velocidades del vapor, a temperatura constante de 250°C

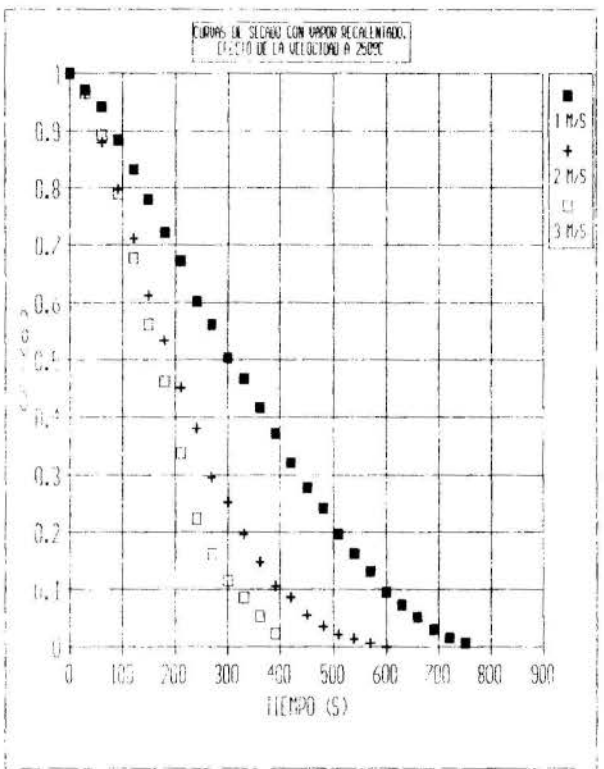


Figura 4.- Perfiles adimensionales de humedad de arena vs. tiempos para diferentes temperaturas del vapor recalentado.

A partir de la pendiente de la zona lineal de la curva de humedad (velocidad de secado constante) se determinó Nc, y en consecuencia el coeficiente h dado por la ec. (6).

La tabla II, muestra los resultados obtenidos de los coeficientes a altas y bajas velocidades de transferencia de masa.

TABLA II Coeficientes de transferencia de calor.

Tipo	T_b	<V>.	h	h	Re.
Arena	(°C)	(m/s)	W/m2°K	W/m2°K	
C-7	200	2	121.3	215.4	6036
C-7	250	2	94.9	204.1	4852
C-7	300	2	83.6	211.0	3993
C-8	200	2	125.1	222.2	6036
C-8	250	2	113.8	244.8	4852
C-8	300	2	95	239.7	3993
C-7	250	1	67.8	145.9	2426
C-7	250	3	124.7	268.1	7278
C-8	250	1	90	193.6	2426
C-8	250	3	150.4	323.6	7278

Los resultados muestran que los coeficientes de transferencia de calor afectados por transferencia de masa varian entre 68 y 150 W/m2K y están en acuerdo con lo informado por Wenzel and White (1951). En cambio los coeficientes limpios sin efecto de la transferencia de masa son superiores numéricamente y se encuentran entre 146 y 324 W/m2K.

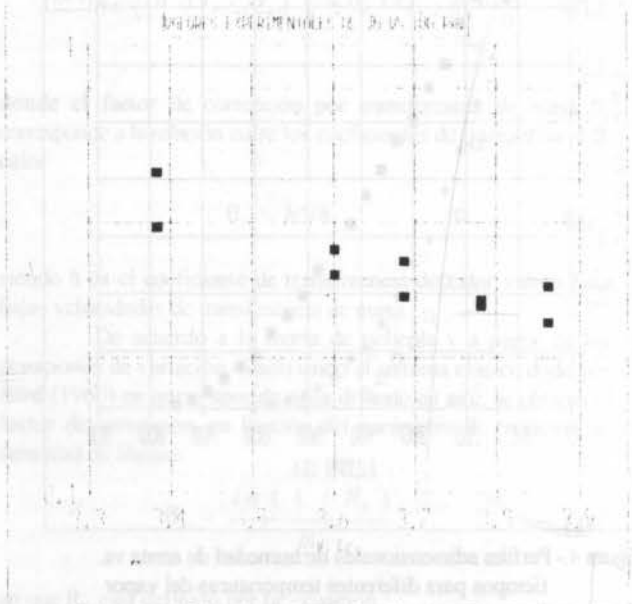


Figura 5.- Representación y correlación de los coeficientes experimentales de transferencia de calor a baja velocidad de transferencia de materia.

A partir de esta información se correlacionaron los coeficientes h' en función de Re, ajustándolos según la ecuación (10). Los parámetro a y n fueron estimados usando técnicas de optimización deWolge (1978), que minimizan la desviación estandar. Los valores obtenidos fueron: para a = 23.5 y para n = - 0.51 resultando la ecuación:

$$J_H = \frac{h'}{<v> \rho_v C_{pv}} Pr^{2/3} = 23.5\ Re^{-0.51} \qquad (11)$$

con una desviación estandard del 9%.

Bird (1960), analiza la transferencia de calor convectivo sobre una placa plana en términos de coeficientes locales, sobre la base de las hipotesis planteadas por la teoria de pelicula . Su correlacion para para h_{local} en la posición x, puede ser integrada a lo largo de la placa de longitud L y reagrupando términos se obtiene finalmente la expresión:

$$J_H = \frac{h'}{<v> \rho_v C_{pv}} Pr^{2/3} = 0.664\ Re^{-0.50} \qquad (12)$$

Nuestros resultados concuerdan en el exponente del Re y muestran una notable diferencia en la constante. Respecto de las hipotesis del modelo, nuestro trabajo presenta algunas diferencias, fundamentalmente en la distorsión de los perfiles de flujo por el impacto sobre la canastilla contenedora del sólido. Esta situación será corregida en trabajos futuros utilizando diseños geométricos menos distorsionantes del flujo de gas.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a CONICYT, proyecto FONDECYT Nº 1950489, y proyecto FONDEF 2-76, por su apoyo económico.

REFERENCIAS

Beeby, C. and O.E. Potter, 1986, " Steam Drying", in *Drying 86*, A.S. Mujumdar, Ed. Hemisphere, New York, pages 41-58.

Bird R.B., Stewart W.E. and Lightfoot E.N., 1960, *Transport Phenomena*, Ch. 21, John Wiley Inc. New York

Das D. , W.J.M. Douglas and R.H. Crotogino, 1985, "Convective Heat Transfer under a Turbulent Impinging Slot Jet at Large Temperature Differences", in *Drying 85*, A.S. Mujundar, ed. Hemisphere, New York , pages 354- 359.

Treybal R.E. *Operaciones de Transferencia de Masa*. Cap. 3.- McGraw-Hill (1991)

Wenzel L. And White R. Drying granular solid in superheated steam. *Industrial and Engineering Chemistry*. Vol. 43, pp.1830 - 1836. USA. 1951.

Wolfe A.,1978, Numerical Method for Unconstrained Optimization. , Ch. 7, Van Nostrand Reinhold Com.

ABSTRACT

The objective of this work, is to study the effect of mass transfer on the heat transfer coefficient in drying with superheated steam.

Drying curves for sand were determined experimentally with parallel superheated steam flow at different temperatures and velocities.

The heat transfer coefficient, afected by mass transfer was determined in the constant rate period and it value was found to be between 68 and 150 W/m^{2}K.

The heat transfer coeficient under low mass transfer are well correlated with the ecuation $J_h = 23.5\ Re^{-0.51}$

AVALIAÇÃO DO PROCESSO DE SECAGEM DE MADEIRA COM AQUECIMENTO EM AMBIENTE SATURADO

José Antonio Bellini da Cunha Neto **Sandro Keine***
Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Santa Catarina
88040-900 Florianópolis SC Brasil

RESUMO

A secagem em estufa de várias partidas de duas espécies de madeira (Curupixá e Eucalipto) são observadas. O processo empregado é o de preaquecimento em vapor saturado e constante aumento de temperatura. A evolução de umidade de amostras é analisada. A secagem natural de pranchas de eucalipto de diferentes espessuras é comparada com a secagem em estufa dessa mesma madeira. São comparadas as taxas de secagem em função do conteúdo de umidade para esses dois casos.

INTRODUÇÃO

Dentre os materiais empregados pelo homem, a pedra e a madeira são os mais antigos e frequentemente encontrados em diferentes aplicações. Contrariamente aos demais materiais utilizados em construção, a madeira é o único produzido biologicamente por um organismo vivo, a árvore. Assim, como as demais matérias vivas, a madeira é formada em um ambiente essencialmente saturado em água. Uma vez abatida, a árvore começa a perder umidade expontânea e lentamente, em conseqüência da ruptura de seu contato com o solo e exposição ao ambiente. Após o processamente inicial, o desdobramento da tora em tábuas, a umidade continua a diminuir com maior ou menor rapidez em função da espécie vegetal, das condições ambientais, das dimensões das peças e do empilhamento utilizado. Associadas à perda de água ocorrem mudanças de propriedades físicas da madeira que são importantes para sua aplicação subseqüente. A utilidade da madeira como material estrutural está relacionada à sua estabilidade dimensional, que por sua vez depende fortemente da umidade que contém. A umidade da madeira utilizável é sempre bem menor que aquela presente na árvore viva. O processamento final, na indústria moveleira por exemplo, só pode ser efetuado quando a umidade atingir valores da ordem de 10% do peso seco. Em conseqüência, a secagem prévia da madeira é exigida pelas razões (Galvão e Jankowsky, 1988):

Aumento da resistência mecânica;

Redução dos riscos de ataque por fungos e microorganismos;

Melhoria da qualidade das junções por cola e adesivos;

Redução das variações dimensionais a limites aceitáveis;

Melhor impregnação com líquidos preservativos e ignífugos;

Melhor aplicação de tintas e vernizes para acabamento superficial.

A secagem da madeira pode ser obtida naturalmente, por exposição ao ambiente, ou em condições controladas em estufas. A secagem em estufa deve ser considerada sob os seguintes aspectos:

Redução considerável do tempo de secagem, reduzindo a quantidade de madeira estocada e o capital de giro correspondente;

Redução, por consequência, da área destinada à secagem de madeira melhorando o aproveitamento do espaço na fábrica;

O ajuste da umidade da madeira de acordo com as condições climáticas do local de uso futuro, independentemente das condições climáticas do local de fabricação ou da época do ano.

A secagem até conteúdos de umidade inferiores àqueles obtidos por secagem natural;

O controle da qualidade da madeira ao final do processo de secagem, reduzindo rachaduras, empenamentos e defeitos superficiais;

A destruição de fungos e insetos comumente presentes na madeira verde;

Neste trabalho é feita uma avaliação do processo de secagem de madeira em estufa com injeção de vapor saturado, utilizando-se temperaturas de bulbo seco e úmido, adquiridas no campo pelo equipamento industrial. No processo analisado o controle é manual e empírico, valendo-se apenas da experiência pessoal do operador.

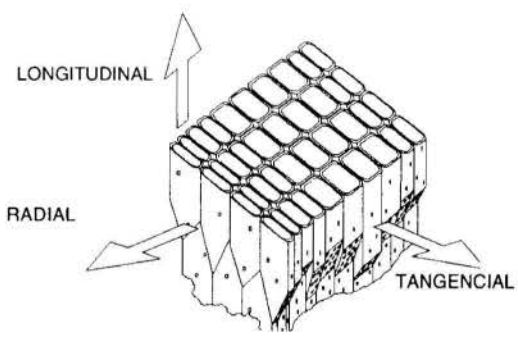


Figura 1 - Direções principais na madeira

ESTRUTURA DO MEIO

A estrutura porosa na madeira, esboçada na figura 1, é condicionada por sua direção de crescimento e pela organização celular, resultando em um meio complexo, heterogêneo e fortemente anisotrópico. Naturalmente o transporte de fluidos na árvore se dá das raízes para as folhas, no sentido do eixo do tronco. O escoamento se faz através de células alongadas, os *traqueídeos*, que fazem parte dos tecidos armazenadores das

* Móveis Alpes Ltda. - Grupo Rudnick
Cx.Postal 203 89290-000 São Bento do Sul SC

reservas alimentares da planta ou prosênquima. As paredes celulares contém aberturas ou *pits*, que são mais numerosos nas extremidades das células. O transporte de massa é feito através dessas aberturas nas extremidades superpostas dos traqueídeos, de uma célula a outra (Siau, 1983). Três direções principais, com propriedades de transporte bastante diferentes, podem ser identificadas na madeira: a direção longitudinal, a direção radial e a direção tangencial. A direção longitudinal apresenta propriedades de transporte de duas a quatro vezes maiores que as radiais. Estas últimas são de mesma ordem de grandeza que as propriedades na direção tangencial embora ligeiramente superiores (cerca de 25% maiores), graças à ocorrência de vasos radiais ligando o centro do tronco à periferia (Skaar, 1988). Para o melhor aproveitamento do sentido de maior resistência mecânica da madeira, o corte em tábuas é feito no sentido longitudinal. Assim, a secagem resulta num transporte de massa principalmente nos sentidos radial e tangencial, exceto nas extremidades da peça.

UMIDADE NA MADEIRA

A umidade está presente na madeira em duas formas: *água adsorvida*, ligada às paredes das células por pontes de hidrogênio e *água "livre"*, retida no interior das cavidades da madeira por forças capilares. A umidade será expressa pelo *conteúdo mássico de umidade*, w, definido como a razão entre a massa de água contida no meio e a massa seca da madeira.

Em geral, após uma exposição prolongada à atmosfera, o equilíbrio é obtido entre a água adsorvida e o ar com uma dada umidade relativa. Admitindo que se exposta a uma atmosfera com umidade relativa de 0% o conteúdo de umidade da madeira seja zero, o conteúdo de umidade de equilíbrio cresce com o aumento da umidade relativa até que esta atinja 100%. Além desse ponto, conhecido por ponto de saturação das fibras (PSF), água só poderá ser encontrada em forma "livre" ou retida por capilaridade.

Praticamente todas as propriedades da madeira são fortemente influenciadas por seu conteúdo de umidade. A medida que a quantidade de água adsorvida aumenta, a madeira se expande, sua resistência mecânica diminui, as condutividades térmica e elétrica aumentam e a taxa de transporte de umidade cresce. Essas mudanças são em geral graduais até que a parede das células estejam saturadas. A partir desse ponto (PSF), com o crescimento da quantidade de água capilar, as variações são de menor ordem.

SECAGEM DA MADEIRA

Como em muitos processos de secagem, a madeira em estufa seca por evaporação da umidade por aquecimento. Tipicamente, as tábuas são empilhadas em camadas espaçadas numa "grade", através da qual o ar aquecido é circulado. O calor latente necessário à vaporização é fornecido por convecção à madeira pelo ar circulante, ao mesmo tempo em que vapor é removido da superfície, dando origem a um gradiente de umidade no sentido da espessura da tábua.

A transferência de calor e massa, conforme mostram Spolek, 1981, e Spolek & Plumb, 1980, se dá em dois fenômenos distintos: convecção, no ar circulante e difusão no interior da madeira. A medida que a umidade é retirada na superfície pelo escoamento de ar, a água capilar é inicialmente removida, dando origem a gradientes de umidade em direção ao interior da peça. Em seguida, as paredes das células começam a perder a água adsorvida iniciando a contração das fibras. Gradientes de umidade severos resultam em tensões internas que podem causar o empenamento da peça e rachaduras na superfície exposta ou no seio do material, e por isso devem a todo custo ser evitados. O transporte de umidade do interior para a superfície através da estrutura celular porosa existe em duas fases: líquida e vapor. O calor é transferido simultâneamente por condução através das duas fases e ainda pelas paredes sólidas das células, bem como transportado por advecção com o escoamento dos fluidos. O mecanismo combinado resultante é consideravelmente complexo. O gradiente de umidade formado depende da taxa de remoção de água por evaporação na superfície, das propriedades de transporte do meio e das dimensões da peça. Uma vez que propriedades como a permeabilidade e a difusividade são muito dependentes do conteúdo de umidade, um controle cuidadoso da taxa de remoção deverá ser executado afim de se prevenir a ocorrência de dois problemas : o encruamento e o colapso da madeira. O encruamento é conseqüência da ruptura da continuidade da fase líquida impedindo a alimentação da superfície em líquido. A secagem superficial prematura impede a remoção eficaz da água do interior das tábuas, aumentando drasticamente o tempo de secagem. O colapso ocorre em conseqüência das elevadas tensões superficiais produzidas quando se desenvolve uma interface curva entre as fases líquida e vapor no interior das células. Em função da grande curvatura da interface, a fase líquida assume pressões muito baixas que podem tracionar as paredes celulares quando estas se encontram fragilizadas, seja por serem delgadas, seja por terem a resistência reduzida pela alta temperatura. O efeito é semelhante ao esmagamento da estrutura. Muito embora tal defeito possa ser recuperado por aquecimento e exposição a vapor saturado durante um longo tempo, o custo da operação é elevado. O controle da taxa de secagem é ainda mais delicado nas madeiras duras (hardwood), que apresentam em geral menores difusividades e permeabilidades, induzindo gradientes de umidade mais intensos que as madeiras macias (softwood).

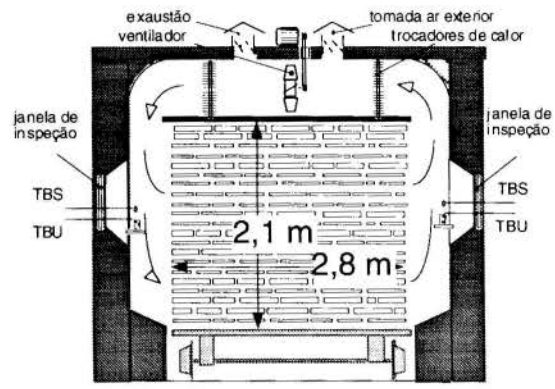


Figura 2 - Seção transversal esquemática das estufas.

ESTUFA UTILIZADA

Os dados foram adquiridos em duas estufas industriais aquecidas a vapor, de 67 m^3 de volume, acomodando em geral uma pilha com 23 m^3 de madeira, colocada sobre vagonetes. Uma seção esquemática da estufa é mostrada na fig. 2. As tábuas podem ter a espessura de 0,027 m ou de 0,045 m. Espaçadores de 0,022 m são usados entre as tábuas. Ventiladores axiais reversíveis acionados por correias promovem a circulação de ar através da pilha. O vapor saturado é alimentado diretamente na corrente de ar dos ventiladores e trocadores de calor tipo tubo aletado aquecem o ar circulante. Uma blindagem na parte superior da pilha evita a exposição das tábuas superiores à radiação emitida pelos trocadores de calor. A cada hora o sentido de circulação de ar é invertido afim de homogenizar a secagem. Ar exterior pode ser adicionado e ar úmido removido da corrente de ar circulante, através de dampers montados sobre o teto da estufa, a fim de promover a diluição da umidade perdida pela madeira. Portas de inspeção permitem o acesso às amostras de controle, cuja evolução de massa está sendo acompanhada.

Dados Adquiridos. Um conjunto de sondas de temperaturas de bulbo seco e bulbo úmido, tipo Pt100, é montado em

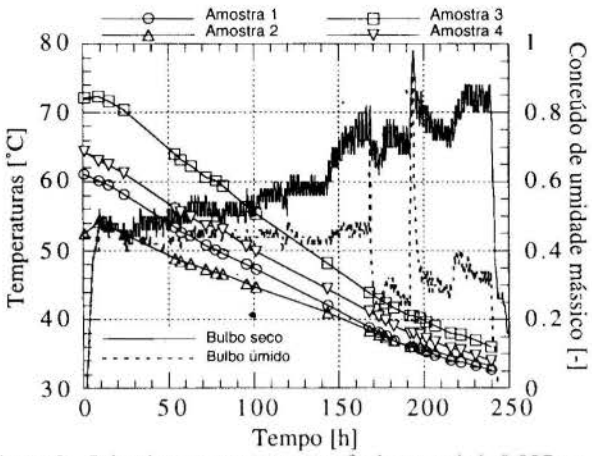


Figura 3 - Primeira secagem em estufa de curupixá 0,027 m.

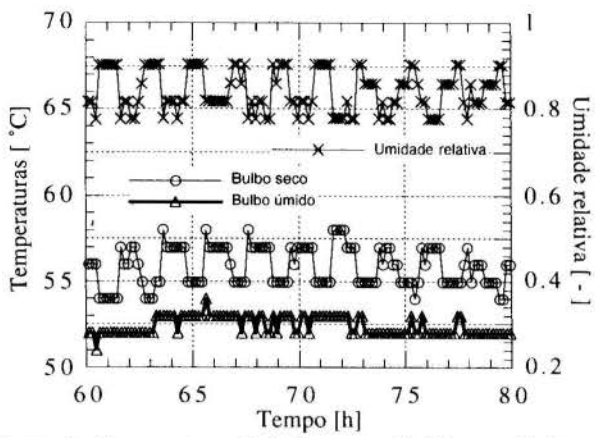


Figura 4 - Temperaturas de bulbo seco, úmido e umidade relativa no insuflamento e no retorno durante a secagem.

cada lado da estufa, fazendo a aquisição das condições de secagem a cada dez minutos. Embora as sondas tenham resolução bem mais elevada, os dados adquiridos são armazenados em microcomputador para tratamento posterior, como valores inteiros de temperatura em °C. As massas das amostras são controladas a intervalos de tempo variáveis durante o processo, por pesagem em balança com resolução de 0,001 kg, e lançadas em planilhas pelo operador. As posições dos registros de alimentação de vapor às serpentinas, de alimentação em vapor saturado e das tomadas de ar exterior e exaustão, são igualmente anotadas.

Material Ensaiado. Duas espécies de madeira foram observadas em secagem: o curupixá (*Rauwolfia Paraensis Ducke*) e o eucalipto (*Eucalyptus Grandis*). Estas duas madeiras, originalmente de baixo valor comercial, têm sido recentemente valorizadas pela indústria em função do desaparecimento das madeiras mais nobres. A exportação de curupixá cresceu de 527 m^3 em 1988 para 22311 m^3 em 1992, ocupando o 5° lugar em madeira exportada naquele ano. O eucalipto, usado largamente em reflorestamento, encontra-se em grande quantidade no mercado a baixo preço. Embora não seja tradicionalmente empregado na indústria moveleira, começa a ser considerado como matéria prima importante. Muito poucos dados são disponíveis sobre a secagem destas espécies, o que justifica as observações deste trabalho.

PROCEDIMENTO DE SECAGEM

A secagem a vapor em estufa se desenvolve em três etapas principais: um aquecimento a vapor para precondicionamento da madeira, a redução gradual da umidade relativa com aumento da temperatura e recondicionamentos intermediário e final com banhos de vapor, num processo conhecido por "Aumento Constante de Temperatura" ou *CRT-Constant Rising Temperature* (Simpson, 1984).

Um dos principais problemas na secagem em estufa é o aparecimento de tensões internas, que provocarão deformações nas peças tão logo sejam cortadas. O alívio destas tensões é conseguido com banhos de vapor durante o aquecimento, durante o processo e após a secagem. O aquecimento inicial sob injeção de vapor favorece o restabelecimento da continuidade da fase líquida, reconectando os poros interiores à superfície, aumentando o transporte interno de líquido. Inicialmente a umidade da madeira pode aumentar mas o ganho em massa é rapidamente perdido tão logo a umidade relativa do ar comece a se reduzir.

Primeiro ensaio. Um processo completo de secagem de curupixá de 0,027 m de espessura (1 polegada nominal) pode ser visto na figura 3, onde são igualmente mostradas as evoluções do conteúdo de umidade das amostras. As dimensões típicas das amostras no início do processo são 0,640 m x 0,220 m x 0,027 m. Estas dimensões podem variar em função da carga de madeira recebida e se reduzem durante o processo pela contração das fibras. Muito embora estas apresentem uma grande variação no conteúdo de umidade inicial, entre 0,45 e 0,85, ao final do processo todas se encontram com umidade entre 0,05 e 0,1. O conteúdo de umidade de equilíbrio do curupixá para a cidade onde se situa a instalação (São Bento do Sul - SC) é em torno de 0,12.

Na primeira etapa, o aquecimento é obtido com injeção de vapor saturado sem a alimentação dos trocadores de calor e sem renovação de ar. A temperatura do ar circulante, totalmente saturado, atinge os 55°C após 8,5 horas.

A segunda etapa é executada com a abertura dos registrso de exaustão e tomada de ar exterior e o fornecimento de calor nos trocadores. A etapa dura cerca de 230 horas, com interrupções após 160 e 185 horas para banhos de vapor de recondicionamento. Esses recondicionamentos são de curta duração (0,4 horas e 0,75 horas, respectivamente) e praticamente não alteram o conteúdo de umidade global da amostra. Durante a etapa, a umidade relativa do ar é gradualmente reduzida pelo aumento da temperatura . Após o primeiro banho de recondicionamento, a umidade relativa sofre uma redução mais intensa pelo aumento de diluição com ar exterior e redução na vazão de vapor injetado na corrente de ar circulante.

Por força do gradual aumento de temperatura a taxa de redução de umidade é aproximadamente constante durante toda a secagem, não sofrendo o decaimento exponencial esperado num processo controlado pelos fenômenos de transporte internos.

A alternância do sentido de circulação de ar expõe os sensores de temperatura ora ao ar de alimentação da pilha, ora

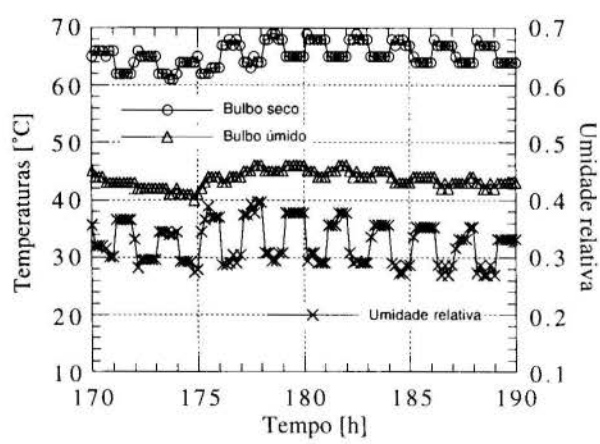


Figura 5 - Temperaturas de bulbo seco, úmido e umidade relativa no insuflamento e no retorno durante a secagem.

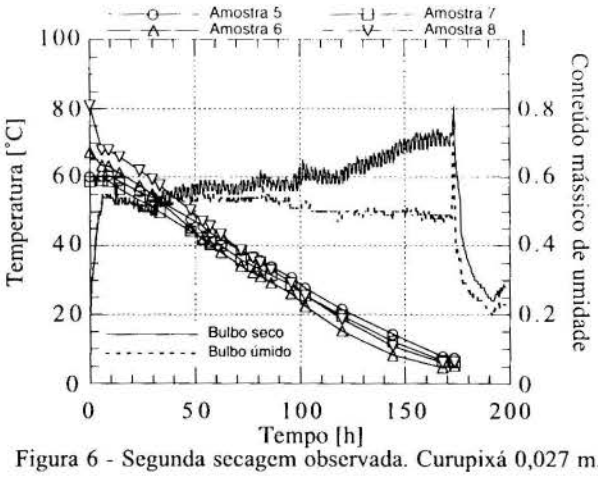


Figura 6 - Segunda secagem observada. Curupixá 0,027 m.

ao ar de retorno. As variações de temperatura e umidade relativa da corrente de ar ao atravessar a madeira podem ser avaliadas para diferentes momentos de mesmo processo de secagem através da figura 4 (entre 60 e 80 horas de secagem) e da figura 5 (entre 170 e 190 horas de secagem). Na etapa inicial, a temperatura de bulbo seco do ar de insuflamento atinge 57°C no insulflamento e 55°C no retorno, enquanto a umidade relativa varia entre 0,78 e 0,90, respectivamente. Numa etapa subseqüente, a temperatura do ar varia de 66°C a 68°C no insuflamento e entre 61°C e 64°C no retorno. As umidades relativas correspondentes são de 0,28 e 0,38, respectivamente. A temperatura de bulbo úmido sofre menores variações quando o ar atravessa a pilha de madeira.

Segundo ensaio. As temperaturas de bulbo seco e úmido e as evoluções de umidade para a segunda secagem observada são mostradas na figura 6. Essa secagem foi executada em 170 horas e as umidades iniciais das amostras se situavam entre 0,8 e 0,6. O aquecimento inicial nesse caso regularizou em parte as diferenças de conteúdo de umidade inicial e o processo de secagem se desenvolveu de forma aproximadamente semelhante para as quatro amostras. O conteúdo de umidade final se situa entre 0,05 e 0,07.

Um único banho de recondicionamento foi executado ao final do processo para alívio das tensões. A temperatura de bulbo seco foi gradualmente aumentada de 55°C até 75°C. No recondicionamento a temperatura chegou por alguns instantes a 80°C. O período de resfriamento, executado com a estufa fechada, sem aquecimento e sem injeção de vapor, com os registros de tomada de ar exterior e exaustão totalmente abertos, ocupa cerca de 15 horas. Essa secagem pode servir como exemplo de processo bem sucedido.

Terceiro ensaio. Embora a secagem com preaquecimento a vapor favoreça a redistribuição de umidade próximo à superfície

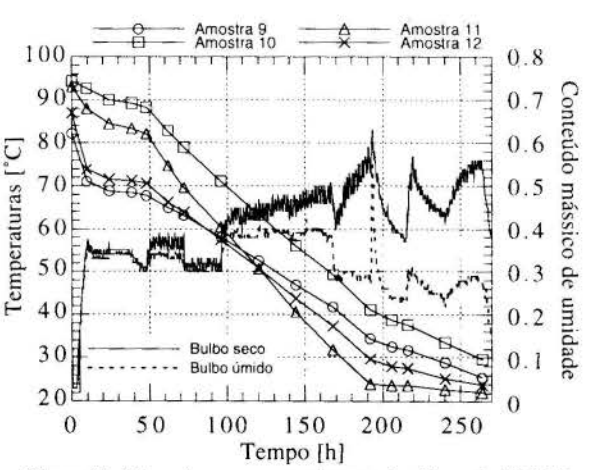


Figura 7 - Terceira secagem observada. Curupixá 0,027 m.

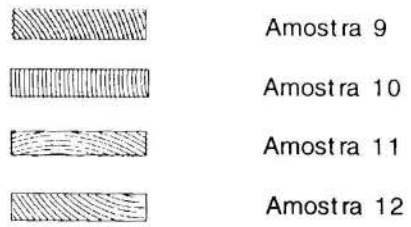


Figura 8 - Sentido do corte da prancha em relação aos anéis de crescimento, para as amostras da terceira secagem.

das pranchas de madeira, nem sempre a evolução da secagem na seqüência do processo se dá de forma equivalente para todas as amostras. Outros fatores podem resultar em secagem heterogênea, como se vê a seguir para o terceiro ensaio de secagem. A figura 7 mostra a evolução da secagem de uma carga de curupixá de espessura 0,027 m (nominal 1 polegada), em termos das temperaturas de bulbo seco, bulbo úmido e dos conteúdos de umidade. As amostras 10 e 11, mesmo tendo umidades iniciais muito próximas (aproximadamente 0,73), seguem curvas de secagem bastante diferentes. A amostra 11 seca muito mais rapidamente, atingindo o conteúdo de umidade de equilíbrio, de próximo dos 0,05, cerca de 75 horas antes que a amostra 10, tendo esta última ainda uma umidade final de 0,1. As amostras 9 e 12, embora sofram uma grande redução de umidade durante o aquecimento, secam a uma taxa menor que a amostra 11 e terminam o processo a 0,07. Pergunta-se por que amostras de madeira de uma mesma partida, da mesma espécie e em condições idênticas secam de forma tão diferente. Relativizadas as diferenças de indivíduos (de árvore para árvore), observou-se que em função da desdobra inicial, feita ainda na floresta, o sentido do corte em relação aos anéis de crescimento determinam sentidos diferentes de migração de umidade em relação aos eixos principais do tronco, como mostra a figura 8. Assim, o transporte de umidade na amostra 10 se faz praticamente no sentido tangencial, de menor permeabilidade, enquanto na amostra 11 a direção predominante é a radial. Em outras secagens o mesmo fenômeno pode ser observado. Em geral este não é um fato de conseqüências graves desde que se espere até que todas as amostras estejam na umidade desejada. Um cuidado especial deverá ser tomado quando da seleção das amostras de controle, de forma a abranger representativamente todo o volume de madeira a ser processado.

Secagem do eucalipto em estufa. O eucalipto é uma espécie de madeira que desenvolve grandes tensões internas quando de sua secagem em estufa. O recondicionamento a vapor se faz mais importante nesse caso (Ananías et alii, 1993, Campbell, 1961). A secagem de uma carga de pranchas de eucalipto de

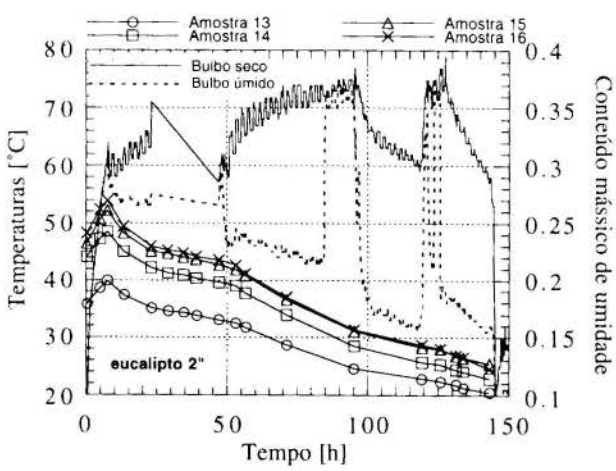


Figura 9 - Secagem em estufa de eucalipto de 0,055 m de espessura (2 polegadas).

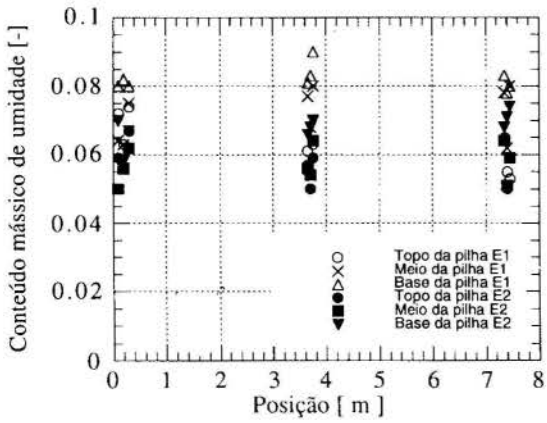


Figura 10 - Distribução espacial do conteúdo de umidade na pilha de madeira após a secagem em estufa.

0,055 m de espessura (nominal 2 polegadas), foi registrada. A madeira já havia permanecido durante algum tempo exposta ao ambiente em grades, de forma que seu conteúdo mássico de umidade se encontrava de certa forma reduzido (três amostras em torno de 0,23 e uma amostra a 0,18). A secagem foi feita com vários recondicionamentos a vapor durante o processo afim de se manterem baixas as tensões internas. Rachaduras no corpo das peças ao fim da secagem são até certo ponto comuns nessas madeiras. Dada a espessura das peças, a perda de umidade foi gradual e uniforme para todas as mostras (13, 14, 15 e 16), após um ganho inicial de massa durante o aquecimento. Os conteúdos de umidade finais se situaram entre 0,1 e 0,13, após 140 horas de secagem. A secagem a vapor de outras partidas de eucalipto de 0,027 m de espessura foram registradas mas não se encontram aqui decritas por não se afastarem significativamente do comportamento deste ensaio. Uma ausência de dados adquiridos entre 25 e 45 horas de secagem causada por pane no equipamento, não resultou em nenhuma descontinuidade importante na evolução de massa.

Heterogêneidades na secagem em estufa. Em duas secagens, a umidade das pranchas foi verificada após o resfriamento, em diferentes posições na pilha, para se avaliar a variação do conteúdo de umidade final. A distribuição do ar circulante é a responsável pela homogeneidade da madeira ao final do processo.

Um medidor elétrico de umidade, do tipo de pinos cravados medindo resistividade, foi utilizado para esse fim, tendo em vista a qualidade aceitável desse tipo de instrumento quando se trata de medir baixos conteúdos de umidade. Os resultados encontram-se mostrados na figura 10.

O eixo das ordenadas corresponde à posição de medição a partir da porta de carregamento da estufa. Três alturas foram avaliadas, três localizações laterais foram tomadas para cada altura e posição. A figura 10 mostra as 54 medidas para as duas estufas, que se dispersam em torno da média de 0,07. A única posição que apresenta uma certa tendência, é a inferior, junto ao vagonete da estufa 1, onde as umidade foram ligeiramente superiores às demais. No entanto a dispersão no todo é bastante aceitável e a qualidade dos resultados é satisfatória.

SECAGEM NATURAL

A título de comparação, uma grade de eucalipto de espessura 0,045 m (nominal 1.5 polegadas), foi acompanhada durante o processo de secagem natural, por exposição ao ambiente. A evolução das massas de três amostras foram acompanhadas semanalmente durante os quatro primeiros meses. Duas delas foram reexaminadas depois de um ano. A figura 11 mostra a evolução dos conteúdos de umidade dessas amostras. A temperatura do ar foi igualmente registrada no momento das pesagens que se realizaram entre 8 h 30 e 16 h 00. As temperaturas registradas são amostras dos valores que esse parâmetro pode assumir durante o dia, no período de secagem (entre junho de 95 e maio de 96).

Na figura 10 foi preservada a escala de tempo em horas para facilitar a comparação com a secagem em estufa. A taxa de secagem é bastante regular no decorrer do processo, pelo menos para as amostras 18 e 19. Aos quatro meses de secagem as aquisições semanais foram encerradas.

Após 8 meses, o conteúdo de umidade desceu apenas 2 pontos percentuais para as amostras remanescentes (18 e 19). A partir desse ponto, muito pouca variação deve ser esperada na massa das amostras.

O tempo de secagem pode ser bastante elevado, chegando a mais de 100 dias. O conteúdo de umidade não cai muito abaixo de 0,2, mesmo após um ano de exposição.

Uma primeira constatação é a de que o conteúdo de umidade para esta espécie de madeira dificilmente cairá a valores inferiores a 0,2 em secagem por exposição ao ar ambiente, dadas as condições do clima local. Uma secagem em estufa é imperativa a fim de viabilizar o uso essa madeira como matéria prima para móveis.

A eficiência da secagem a vapor não pode ser avaliada pela simples comparação dos tempos de secagem. A principal resistência no processo, excetuando-se os instantes iniciais, é o transporte de massa do interior da madeira até a superfície. Um parâmetro que pode ser usado como referência é a taxa de secagem para um certo nível de conteúdo de umidade. A figura 12 mostra as taxas de secagem em funcão dos conteúdos médios de umidade para diversas operações com eucalipto de 0,027 m, 0,045 m e 0,055 m de espessura (1", 1.5", e 2" nominais), em

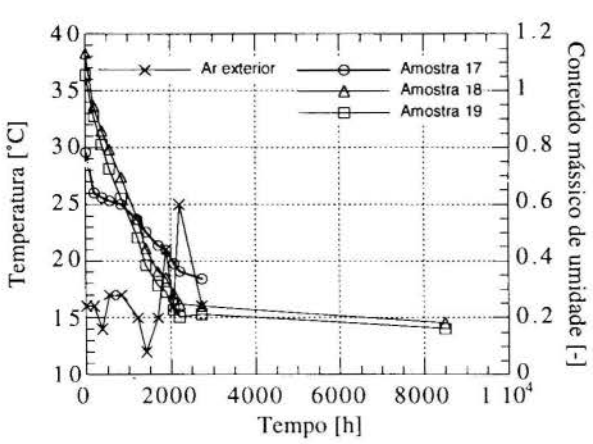


Figura 11 - Secagem natural de eucalipto de 0,045 m (espessura nominal 1,5 polegadas).

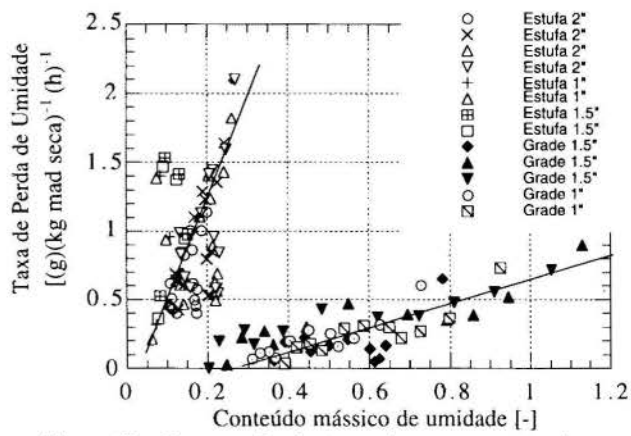


Figura 12 - Comparação das taxas de secagem natural e em estufa em função do conteúdo de umidade para eucalipto de diferentes espessuras

grades e em estufa a vapor. Os dados indicam claramente taxas de secagem significativamente mais elevadas para a secagem em estufa, mesmo a baixos conteúdos de umidade onde as permeabilidades são menores. As retas na figura 12 são apenas indicativas, não representando regressões lineares sobre os dados.

CONCLUSÕES

As observações de secagens a vapor de pranchas de espessuras variadas de eurupixá e eucalipto, colocou em evidência alguns aspectos deste processo de secagem:

• A redução do tempo de secagem, de alguns meses em secagem natural, para menos de 10 dias em estufa.

• O precondicionamento provocado pelo aquecimento em banho de vapor saturado, reduz as tensões internas e restabelece os caminhos da fase líquida entre o interior das pranchas e a superfície, implicando em aumento das taxas de transporte de umidade e melhoria da qualidade do produto final em termos de fissuras superficiais e deformações, como pode ser qualitativamente verificado por inspeção visual.

• O conteúdo mássico de umidade final é satisfatoriamente uniforme, mesmo quando a carga de madeira apresenta considerável variação de conteúdo de umidade inicial.

• A distribuição espacial da umidade final na pilha é bastante uniforme não apresentando regiões de secagem mais acentuada.

• A qualidade dos dados adquiridos pelo equipamento de controle industrial, não permite que se façam modelos preditivos do comportamento da secagem, para madeiras diferentes das ensaiadas. A baixa resolução das medidas de temperatura mascaram variações menores que 1°C.

• A automatização do processo pode ser feita desde que programas de secagem sejam concebidos de forma a reproduzir os procedimentos até agora utilizados. A evolução da umidade contida nas amostras deve ser um parâmetro de controle, mas a aquisição não pode ser feita por medidores elétricos do tipo resistivo. Estes apresentaram um funcionamento insatisfatório, sobretudo para altos conteúdos de umidade (madeira verde), e não foram considerados neste estudo.

• Os banhos de vapor intermediários para recondicionamento e alívio de tensões internas, melhoram a qualidade do produto final, sem no entanto retardar o processo de secagem.

• Altas taxas de remoção de umidade podem ser conseguidas, ainda que a conteúdos de umidade baixos, sem que a madeira entre em colapso ou sofra encruamento.

• As taxas de secagem são mantidas constantes durante todo o processo pelo aumento da temperatura.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Móveis Alpes Ltda. de São Bento do Sul, SC, a aquisição e fornecimento dos dados de secagem utilizados nesse trabalho.

REFERÊNCIAS

Ananías, R.A., Espinoza, L.G., Kauman, W.G., 1993, "Efecto del Pretratamiento en Ambiente Saturado Sobre el Aliviamiento de Tensiones y la Recuperacion del Colapso Durante el secado de Eucalipto", *Simposio Los Eucaliptos en el Desarrollo Forestal de Chile*, Noviembre, Puncón, Chile.

Campbell, G.S., 1961, "The Value of Presteaming For Drying Some Collapse-Suscetible Eucalyptus", *Forest Products Journal*, August, p.343-347.

Galvão, A.P.M., Jankowsky, I.P., 1988, *Secagem Racional da Madeira*, 1a. edição, 1a. reimpressão, Editora Nobel, São Paulo, 108 p.

Siau, J. F., 1983, *Transport Processes in Wood*, editora Springer-Verlag, New York, 245 p.

Simpson, W.T., 1984, "Drying Wood: A Review-Part I", *Drying Technology*, Vol 2 no. 2, p.235-264.

Skaar, C., 1988, *Wood-Water Relations*, editora Springer-Verlag, New york, 283 p.

Spolek, G.A., 1981, "A Model of Simultaneous Convective, Diffusive and Capillay Heat and Mass Transport in Drying Wood", *Ph.D. Thesis*, Washington State University, Pullman, WA.

Spolek, G.A., Plumb, O.A., 1980, "A Numerical Model of Heat and Mass Transport in Wood During Drying", Proceedings of Drying'80, editado por H.S. Mujumdar, McGill University, Montreal, p.84-92.

ABSTRACT

Several wood drying runs in a kiln using steam heating were observed, for two wood specimens: *Rauwolfia Paraensis Ducke* and *Eucalyptus Grandis*. High rates of moisture removing were obtained by preheating the wood with satured vapour and then gradually rising air dry bulb temperature. Drying stress relief was achieved by the use of intermediate reconditioning vapour bath. Differences in drying rates for some samples in identical conditions were observed and attributed to the direction of moisture migration during the process referring to the principal directions in wood (longitudinal, radial or tangential). Natural drying of wood by exposition to environment have been also observed and compared to kiln drying.

ABCM

SIMULAÇÃO DE SECADORES REAIS BIDIMENSIONAIS

Souza, J.L.F. e Ferreira, W.R.
Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Minas Gerais
31.270-901 - Belo Horizonte - MG - Brasil

RESUMO

Este trabalho apresenta uma análise de secadores reais estacionários. A modelagem envolveu uma equação modificada de Darcy que é altamente não-linear, as equações de continuidade e energia para o ar úmido e para os grãos e uma equação de secagem em camada fina para os grãos. Apresentam-se resultados para secadores unidimensional, bidimensional e axissimétrico. O secador axissimétrico é utilizado na EMBRAPA para secagem de grãos de milho.

INTRODUÇÃO

Secagem é um processo de transferência simultânea de calor e massa, cuja finalidade é a diminuição do teor de umidade do grão de modo a preservar sua qualidade (Brooker *et al.*, 1974). A secagem de grãos em camada fina e em camada espessa tem sido estudada por um grande número de pesquisadores. Parry (1985) e Parti (1993) publicaram uma extensa revisão sobre modelos de secagem em camada fina. Revisões recentes sobre secagem em camada espessa foram feitas por Cenkowski *et al.*(1993).

Várias teorias de secagem de grãos têm sido propostas para descrever os processos de transferência de calor e massa (Bakker-Arkema *et al.*, 1967; Boyce, 1965 e 1966; Thompson *et al.*, 1968; Henderson e Henderson, 1968).

Simulações numéricas de secagem de milho foram feitas por: Queiroz *et al.*(1984/1985), em secador de fluxos concorrentes; Sinicio *et al.*(1986/1987) e Rumsey(1991) em camadas espessas estacionárias. Patil(1987) apresentou um modelo logarítmico e um modelo de fluxo cruzado para a simulação de secagem com recirculação. Cenkowski e Sokhansanj(1988) adaptaram um modelo de secagem concorrente para secagem de corrente cruzada em secador circular. Moreira e Bakker-Arkema (1990) desenvolveram um modelo teórico de não equilíbrio de múltiplo-estágio em um secador concorrente de trigo.

Martins(1982) simulou a secagem de grãos em leito estacionário e comparou seus resultados com dados experimentais da literatura. França(1991) e França *e* Fortes(1994) desenvolveram um modelo bidimensional em leito fixo de grãos, através de modificações feitas no modelo de Brooker *et al.* (1974). O modelo incorporou a análise do escoamento de ar no interior do secador e a dependência da massa específica do ar com a temperatura. Os resultados de França(1991) foram comparados com os de Martins(1982).

O presente trabalho tem como objetivos:

- utilizar o modelo de secagem apresentado por França(1991) para simular a secagem uni e bidimensional utilizando o método de elementos finitos (MEF), e comparar os resultados com a solução obtida por França(1991) usando o método de volumes finitos (MVF) e Martins (1982);
- utilizar o modelo desenvolvido para simular a secagem de grãos em um secador real utilizado na indústria.

CONSIDERAÇÕES FÍSICAS DO MODELO PROPOSTO

O modelo matemático em camada estacionária de Brooker *et al.*(1974) foi desenvolvido a partir das considerações abaixo:

- a contração volumétrica do leito de grãos é desprezível durante a secagem;
- o gradiente de temperatura dentro dos grãos, isoladamente, é desprezível;
- as paredes do secador são adiabáticas, com capacidade calorífica desprezível;
- a transferência de calor por condução, entre os grãos, é desprezível;
- as capacidades caloríficas do ar e do grão são constantes em pequeno intervalo de tempo;
- utiliza-se um modelo unidimensional para análise dos fenômenos de transporte, sendo que as mudanças de temperatura e umidade do ar em relação ao tempo são consideradas desprezíveis quando comparadas com a mudança de temperatura e umidade do ar em relação a posição no leito de grãos na direção do fluxo de ar ;
- o escoamento do ar é uniforme;
- a equação de secagem em camada fina e a isoterma de equilíbrio são conhecidas.

O modelo a ser utilizado incorpora as seguintes ampliações em relação ao modelo de Brooker *et al.* (1974):

- um modelo bidimensional é utilizado para a análise do escoamento do ar úmido no meio poroso (leito de grãos), dentro do secador e para a análise dos fenômenos de transporte entre o ar e o leito;
- são consideradas as mudanças de temperatura e umidade do ar em relação ao tempo ($\partial T/\partial t$ e $\partial W/\partial t$);

As equações resultantes deste modelo foram resolvidas utilizando o MEF, considerando um secador de grãos de milho debulhado em regime transiente. Analisou-se três tipos de secadores: unidimensional, bidimensional e axissimétrico.

MODELAMENTO MATEMÁTICO

Processo de escoamento em meios porosos. Para escoamento através de meio poroso no qual a variação de massa específica do fluido é desprezível com a variação de pressão, as equações da continuidade modificada e da quantidade de movimento (Lei de Darcy) são respectivamente:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_a)}{\partial t} = -\left(\nabla.\rho_a\dot{v}\right) \quad e \quad \dot{v} = \frac{-k_o}{\mu}\left(\nabla P - \rho_a\dot{g}\right) \qquad (1)$$

em que $\vec{v}$ é o vetor velocidade superficial, ε a porosidade (volume de poros/ volume total), k_0 a permeabilidade do meio poroso, μ a viscosidade absoluta do ar seco, $\vec{g}$ o vetor aceleração da gravidade, P a pressão e ρ_a a massa específica do ar seco e t é o tempo.

Desprezando o efeito da gravidade e considerando que o coeficiente de permeabilidade dado por $K=k_0/\mu$, a equação de Darcy pode ser escrita como:

$$\vec{v} = -K\nabla P \tag{2}$$

Substituindo a velocidade superficial (vazão volumétrica por área da seção transversal do meio poroso), Eq. (3), na equação da continuidade, Eq. (1), obtém-se:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_a)}{\partial t} = \nabla.(\rho_a K\nabla P) \tag{3}$$

Supondo que o termo convectivo seja muito maior que a variação temporal da massa específica, em se tratando de solução numérica, a Eq. (3) torna-se:

$$\nabla(\rho_a K\nabla P) = 0 \tag{4}$$

Partindo do fato de que o coeficiente de permeabilidade depende das propriedades do meio poroso, Shedd (1953) obteve uma equação de quantidade de movimento, baseada em dados experimentais para o caso de grãos cereais. Essa expressão correlaciona vazão da ar e gradiente de pressão e pode ser expressa por:

$$Q = A\left(\frac{\partial P}{\partial n}\right)^B \tag{5}$$

em que Q é a vazão volumétrica por unidade de área ($m^3/s\ m^2$); $\partial P/\partial n$ o gradiente de pressão na direção do fluxo (Pa/m) e A e B parâmetros que variam com o tipo de grão e com o ∇P.

Comparando as Eqs. (2 e 5) conclui-se que:

$$K = A|\nabla P|^{(B-1)} \tag{6}$$

A Eq.(4) torna-se não-linear, devido à presença do coeficiente de permeabilidade modificado e possui as seguintes condições de contorno:

- *Análise unidimensional*
  - i) Condição de contorno de Neumann
    grad $P = -K^{-1}|\vec{v}|$ (entrada)
  - ii) Condição de contorno de Dirichlet
    P_{out} (saída)
  - iii) Condição de contorno de Neumann
    Como a velocidade do ar é nula nas paredes do secador (paredes impermeáveis), o gradiente de pressão normal à parede também é nulo: grad $P = 0$
- *Análise bidimensional*
  - i. Condição de contorno de Dirichlet
    $P = P_{in}$ (entrada) e P_{out} (saída)
  - ii. Condição de contorno de Neumann
    grad $P = 0$

Balanços de Massa e Energia. Os balanços a seguir foram feitos para o sistema de coordenadas cartesianas. As equações resultantes são facilmente transformadas para coordenadas cilíndricas para serem utilizadas na simulação do secador axissimétrico.

- *Balanço de massa para o ar úmido*

O balanço de massa para o vapor pode ser representado da seguinte forma: *taxa de acúmulo de vapor dentro do volume de controle (V.C.) = taxa líquida de vapor entrando na superfície de controle (S.C.) + geração de vapor dentro do V.C., resultando em:*

$$\frac{\partial(\rho_a W)}{\partial t} + \frac{\vec{v}}{\varepsilon}\nabla(\rho_a W\vec{V}) = -\frac{\rho_P}{\varepsilon}\frac{\partial M}{\partial t} \tag{7}$$

em que $\vec{v}$ é o vetor velocidade do ar, M o teor de umidade do leito na base seca e W a umidade absoluta do ar.

O balanço de massa para o ar seco é feito de maneira análoga ao do vapor e pode ser representado da seguinte forma: *taxa de acúmulo de ar seco dentro do V.C. = taxa líquida de ar seco entrando na S.C.*, que resulta em:

$$\frac{\partial\rho_a}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon}\nabla.(\rho_a\vec{v}) = 0 \tag{8}$$

Expandindo as derivadas da Eq.(7) e reagrupando os termos obtém-se:

$$W\left[\frac{\partial\rho_a}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon}\nabla.(\rho_a\vec{v})\right] + \rho_a\left[\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\vec{v}}{\varepsilon}\nabla W\right] = -\frac{\rho_P}{\varepsilon}\frac{\partial M}{\partial t} \tag{9}$$

Como o primeiro termo da Eq.(9) é a equação da continuidade para o ar seco (Eq. 8), a equação final do vapor contido no ar é dada por:

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\vec{v}}{\varepsilon}\nabla W = -\frac{\rho_P}{\varepsilon\rho_a}\frac{\partial M}{\partial t} \tag{10}$$

- *Balanço de energia para o ar úmido*

O balanço de energia para o ar úmido pode ser representado da seguinte forma: *taxa de acúmulo de entalpia dentro do V.C. = taxa líquida de entalpia entrando na S.C. + fluxo de calor transferido do ar para o leito por convecção + taxa de entalpia transferida do leito para o ar*, resultando em:

$$\frac{\partial\{\rho_a[c_a T + W(h^0 + c_v T)]\}}{\partial t}\varepsilon + \frac{\partial\{\rho_a v_x[c_a T + W(h^0 + c_v T)]\}}{\partial x} + \frac{\partial\{\rho_a v_y[c_a T + W(h^0 + c_v T)]\}}{\partial y} = -ha(T-\theta) - \frac{\partial M}{\partial t}\rho_p(h^0 + c_v T) \tag{11}$$

em que h_v é a entalpia do vapor d'água, h^0 a entalpia no estado de referência a 0°C, T e θ as temperaturas do ar e do produto, c_c e c_v os calores específicos para o ar seco e o vapor respectivamente.

Rearranjando a equação anterior e substituindo as equações de continuidade para o vapor e para o ar, tem-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\vec{v}}{\varepsilon}\nabla T = -\frac{ha(T-\theta)}{\varepsilon\rho_a(c_a + Wc_v)} \tag{12}$$

- *Balanço de energia para o produto*

O balanço de energia para o leito de grãos pode ser representado da mesma forma que o balanço de energia para o ar, resultando em:

$$\frac{\partial[\rho_p\theta(c_p + c_w M)]}{\partial t} = ha(T-\theta) + [c_w\theta + h_{fg} + c_v(T-\theta)]\rho_p\frac{\partial M}{\partial t} \tag{13}$$

em que h_{fg} é o calor latente de vaporização da água

O termo $c_w\theta + h_{fg} + c_v(T-\theta)$ representa a entalpia, h_v, requerida para aquecer os grãos, evaporar a água dos grãos e aquecer o vapor de água evaporado dos grãos.

Expandindo a derivada parcial em relação ao tempo e rearranjando, obtém-se:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \frac{ha(T-\theta)}{\rho_P(c_P + c_w M)} + \frac{h_{fg} + c_v(T-\theta)}{(c_P + c_w M)}\frac{\partial M}{\partial t} \tag{14}$$

- *Balanço de massa para o produto*

A equação empírica de secagem em camada fina mais utilizada pela literatura, tem sido a equação de Thompson (1968):

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{M_e - M}{3600\sqrt{A^2 + (1/900)Bt}} \qquad (15)$$

em que M_e é o teor de umidade de equilíbrio, $A = -4{,}10497 + 0{,}008784 \times T$ e $B = 1{,}66209 \times 10^9 \times \exp(-5{,}9418 \times 10^{-2} \times T)$.

O teor de umidade de equilíbrio, M_e, é dado pela equação de Henderson, modificada por Thompson (1968):

$$M_e = \left[\frac{\ln(1 - RH)}{-0{,}688(T - 227)}\right]^{1/2} \qquad (16)$$

em que RH é a umidade relativa do ar.

Condições iniciais e de contorno. As propriedades do ar (umidade absoluta e temperatura) e dos grãos (teor de umidade e temperatura) são estabelecidas no início do processo de secagem (tempo = 0) $\Rightarrow$ $W = W_0$; $T = T_0$; $M = M_0$; $\theta = \theta_0$.

As propriedades do ar são conhecidas na entrada do secador (tempo > 0): $W = W_{in}$ e $T = T_{in}$.

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO

As equações resultantes foram resolvidas através do MEF. A seguir, apresenta-se uma visão da metodologia utilizada para a solução da equação de pressão (Eq.4) que é elíptica, e das equações de balanço de massa e energia que são hiperbólicas.

As equações diferenciais a serem resolvidas podem ser escritas, na forma geral:

$$\lambda \frac{\partial \Phi}{\partial t} + C_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} + C_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} = D_x(\Phi) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + D_y(\Phi) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} - G\,\Phi + Q \qquad (17)$$

em que, Φ é a variável de interesse, λ o coeficiente do termo temporal, C o coeficiente do termo convectivo, D o coeficiente do termo difusivo, G o coeficiente que multiplica Φ e Q é o termo fonte.

Discretização da equação elíptica. Quando a pressão é a variável de interesse a Eq.(17) torna-se :

$$D_x(P) \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + D_y(P) \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0 \qquad (18)$$

que, discretizada através da formulação de Galerkin, resulta em:

$$\left[R^{(e)}\right] = -\int_A [N]^T \left[D_x(P) \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right) + D_y(P) \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)\right] dA = 0 \qquad (19)$$

Usando a regra do produto para derivadas nas direções x e y e o teorema de Green, tem-se:

$$\left[R^{(e)}\right] = \int_A \left[D_x(P) \frac{\partial [N]^T}{\partial x}\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right) + D_y(P) \frac{\partial [N]^T}{\partial y}\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)\right] dA - \int_\Gamma [N]^T \left[D_x(P) \frac{\partial P}{\partial x} dy + D_y(P) \frac{\partial P}{\partial y} dx\right] \qquad (20)$$

A dependência do coeficiente difusivo D, com os gradientes de pressão torna a Eq. (18) altamente não linear.

Discretização das equações hiperbólicas. As equações de conservação de massa e energia não possuem os termos difusivos, logo a Eq.(17) torna-se :

$$\lambda \frac{\partial \Phi}{\partial t} + C_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} + C_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} + G\,\Phi = Q \qquad (21)$$

Discretizando a equação acima através da formulação de Galerkin, tem-se:

$$\left[R^{(e)}\right] = -\int_A [N]^T \left[-\lambda \frac{\partial \Phi}{\partial t} - C_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} - C_y \frac{\partial \Phi}{\partial y} - G\Phi + Q\right] dA = 0 \qquad (22)$$

A Eq. (21) requer uma condição inicial e uma condição de contorno quando a variável de interesse é a umidade absoluta ou a temperatura do ar. Por outro lado, quando a variável de interesse é o teor de umidade ou a temperatura do leito de grãos, a equação necessita somente de uma condição inicial.

A formulação de elementos finitos para as equações elípticas e hiperbólicas em coordenadas cilíndricas foi feita de maneira análoga.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Apresentam-se, a seguir, os resultados simulados para os seguintes casos:

Caso 1. Secador unidimensional. Simulou-se a secagem em secador unidimensional com escoamento na direção horizontal. Os resultados obtidos da simulação foram comparados com os de França (1991) e os de Martins (1982). As Figs. 1 e 2 mostram a variação de temperatura do leito ao longo do secador em dois tempos diferentes. No início da secagem, os resultados do modelo apresentam um desvio em relação aos dados experimentais no máximo de 5%. Ao longo do tempo, as diferenças entre os modelos ficam desprezíveis. Nota-se nas figuras que o MEF resulta em um tempo de secagem menor que o obtido por Martins e o MVF prevê um tempo maior.

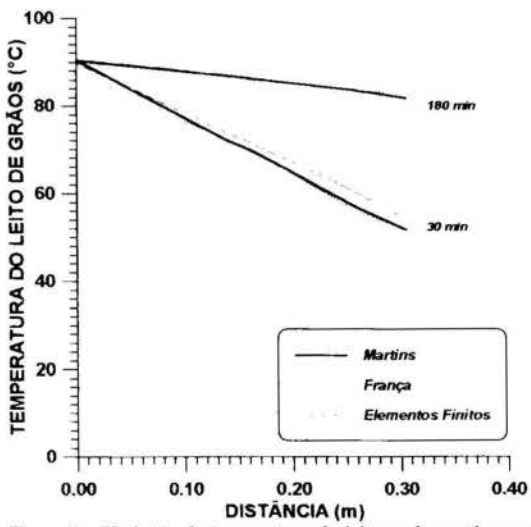


Figura 1 - Variação de temperatura do leito ao longo do secador, para t = 30min e t = 180 min.

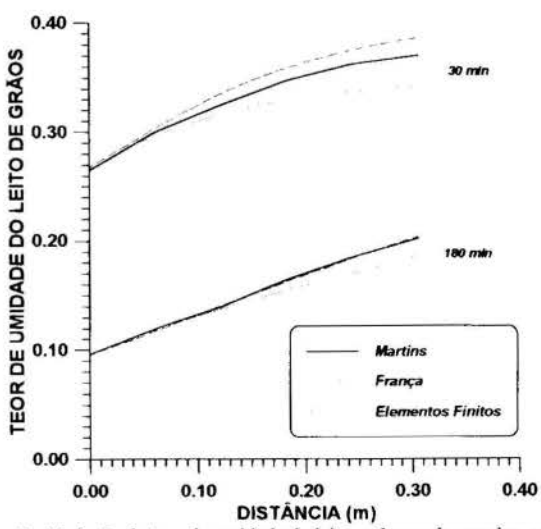


Figura 2 - Variação do teor de umidade do leito ao longo do secador, para t = 30 min e t = 180 min.

Caso 2. Secador bidimensional. A Figura 3 mostra o esquema de fluxo no secador, e as dimensões usadas na simulação.

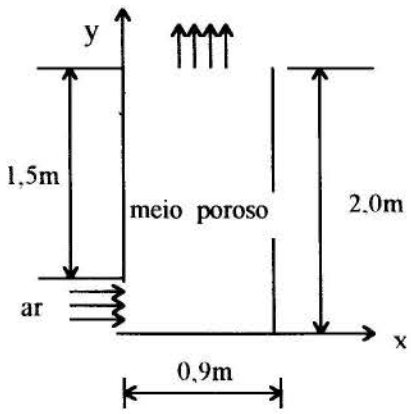


Figura 3 - Geometria do secador

As Figuras 4 e 5 mostram a evolução da frente de secagem ao longo do secador com o tempo e as Figuras 6 e 7 mostram a distribuição do teor de umidade no secador ao longo do tempo. Pode-se perceber que, próximo à entrada do secador, os grãos atingem temperaturas muito elevadas e teores de umidade muito baixos fato que pode resultar em perdas de produto. Uma distribuição mais adequada de ar entrando no secador seria desejável, para permitir uma uniformização da secagem no leito. Posteriormente, serão simuladas outras geometrias com o objetico de evitar estes pontos de deterioração dos grãos.

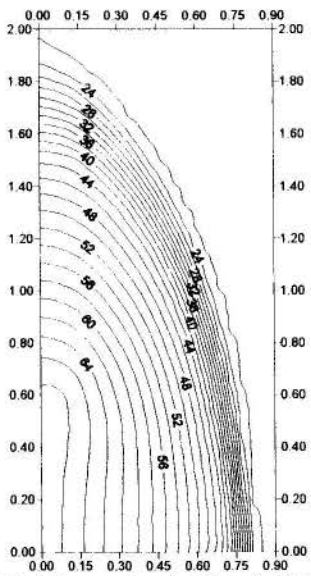


Figura 4 - Distribuição de temperatura do leito após 1h de secagem.

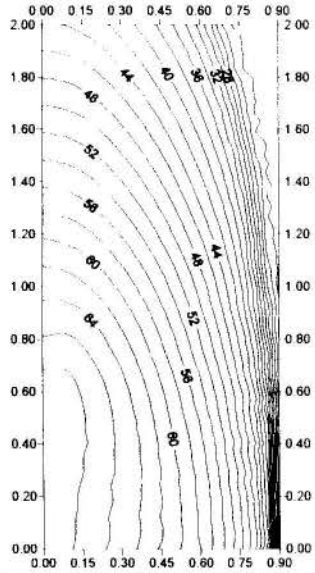


Figura 5 - Distribuição de temperatura do leito após 2h de secagem.

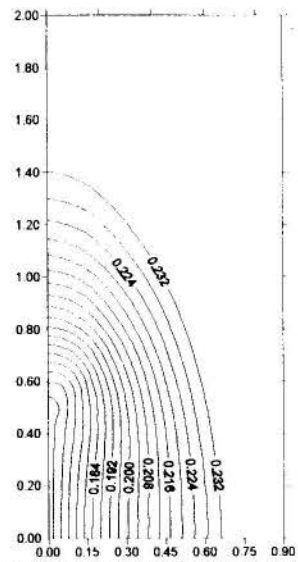


Figura 6 - Distribuição do teor de umidade do leito após 1h de secagem.

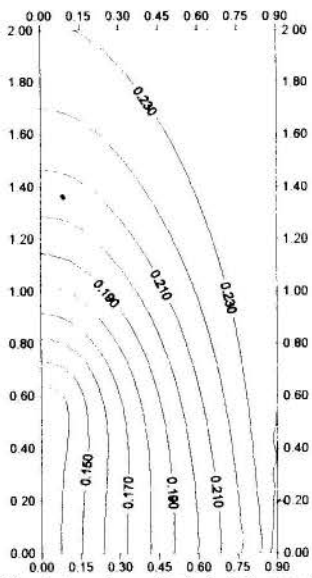


Figura 7 - Distribuição do teor de umidade do leito após 2h de secagem.

Caso 3. Secador Axissimétrico. Simulou-se a secagem de milho em um secador real utilizado na EMBRAPA. A Figura 8 mostra o desenho do secador com a especificação dos componentes principais.

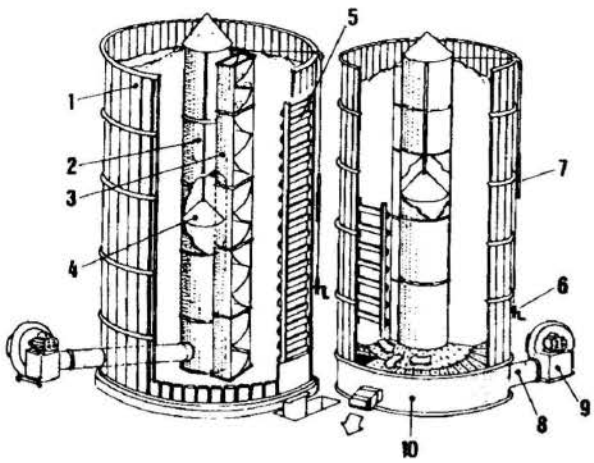


Figura 8 - Secador Estacionário de Grãos da EMBRAPA.

Os componentes da Fig.8 são:

1.Painéis de madeira com venezianas de plástico; 2.Tubo central de ventilação; 3. Escada amortecedora de sementes; 4. Válvula de controle e distribuição de ar; 5. Dispositivo de descarga e homogeneização; 6. Comando de válvula de controle e distribuição de ar; 7. Mostrador do nível da válvula de distribuição do ar; 8. Tubo de entrada do ar; 9. Ventilador radial e 10. Base metálica com fundo cônico perfurado

A Figura 9 apresenta o esquema do fluxo de ar no secador axissimétrico e as dimensões do secador. Simulou-se a secagem considerando uma situação real permitindo-se a comparação dos resultados numéricos com os dados experimentais obtidos na indústria. As condições utilizadas foram: fluxo de ar de 9500 m^3/h, temperaturas de ar de secagem iguais a 42, 46 e 50^0C e temperatura inicial do milho em torno de 20 ^0C.

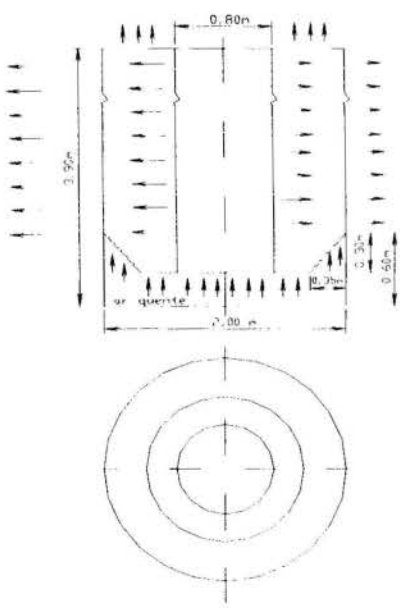


Figura 9 - Esquema do fluxo de ar no secador axissimétrico.

As Figuras 10-12 mostam o efeito da temperatura do ar de secagem sobre o teor de umidade do leito após 4 horas de secagem para 3 posições ao longo da altura do secador. Os valores experimentais não são precisos devido a falta de equipamentos de controle de temperatura e umidade do ar na entrada do secador. Além disso, ao longo do processo real a temperatura do ar na entrada do secador não é mantida constante, pela mesma falta de controle, e na simulação esta temperatura foi considerada fixa ao longo do processo.

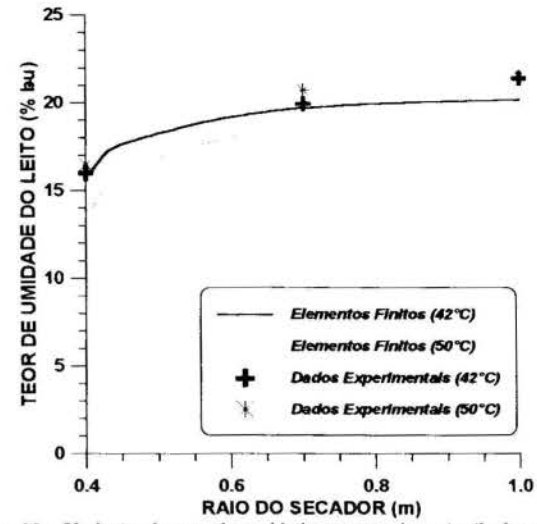


Figura 10 - Variação do teor de umidade com o raio após 4h de secagem para uma altura de 0,36m .

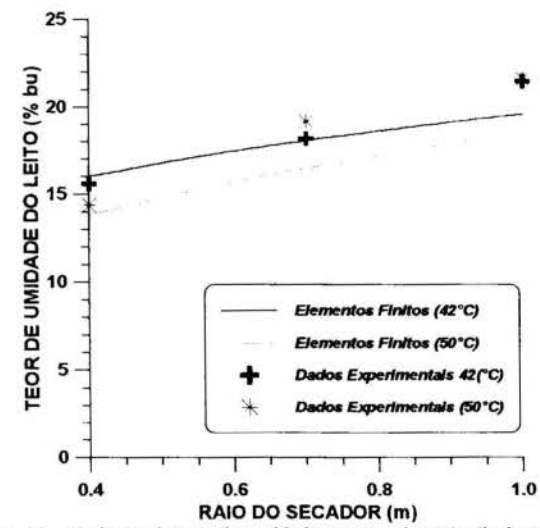


Figura 11 - Variação do teor de umidade com o raio após 4h de secagem para uma altura de 1,80m .

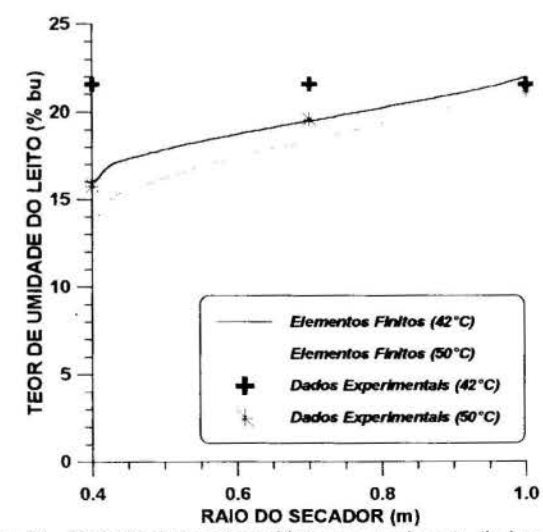


Figura 12 - Variação do teor de umidade com o raio após 4h de secagem para uma altura de 3,60m .

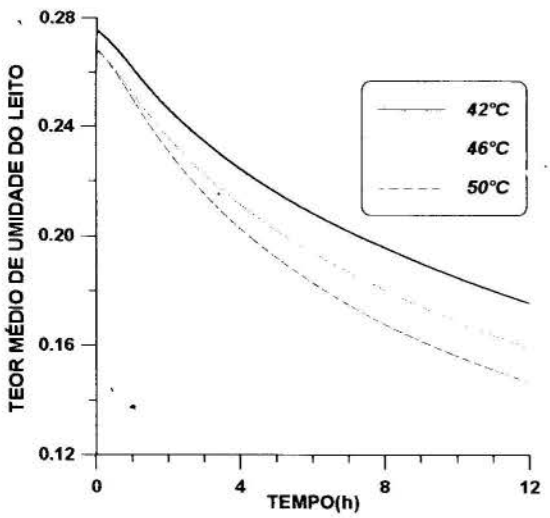


Figura 13 - Efeito da temperatura de secagem do ar sobre a variação do teor médio de umidade do leito com o tempo.

CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou uma análise de secadores reais estacionários usando um modelo que envolveu uma equação modificada de Darcy, as equações de continuidade e energia para o ar úmido e para os grãos e uma equação de secagem em camada fina para os grãos. Os resultados obtidos foram comparados com dados da literatura para o secador unidimensional e bidimensional e com dados experimentais de um secador da EMBRAPA para o secador axissimétrico. Os resultados mostraram que o modelo pode ser utilizado para simular vários tipos de secadores de leito estacionário.

O modelo pode facilmente ser adaptado para simular secadores de geometrias mais complexas e, com pequenas modificações, simular secadores concorrentes. Para secadores de correntes cruzadas e contracorrentes, as condições de contorno devem ser cuidadosamente estudadas.

AGRADECIMENTOS - Os autores agradecem o suporte financeiro fornecido pelo CNPq (Conselho Nacional para o Desenvolvimento Científico e Tecnológico) e pela CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bakker-Arkema, F.W., Bickert, W.G. and Patterson, R.J., 1967, Simultaneous heat and mass transfer during the cooling of a deep bed of biological products under varying inlet conditions, *Journal Agricultural Engineering Research*, Vol.12, 297-307.

Boyce, D.S., 1965, Grain moisture and temperature changes with position and time during through drying, *Journal Agricultural Engineering Research*, Vol.10, 333-34.

Boyce, D.S., 1966, Heat and moisture transfer in ventilated grain, *J. Agric. Eng. Research*, Vol.11, 255-265.

Brooker, D. B., Bakker-Arkema, F. W. and Hall, C. W., 1974, *Drying Cereal Grains*, The AVI Publ. Co. Inc., 265p.

Cenkowski, S., Jayas, D.S. and Paris, S., 1993, Deep-bed grain drying: A review of particular theories, *Drying Technology*, Vol.11(7), 1553-1581.

França, A.S., 1991, Simulação bidimensional de secadores de grãos cereais, *Tese de Mestrado*, Departamento de Engenharia Mecânica, UFMG, MG, Brasil.

França, A.S. and Fortes, M., 1994, Numerical simulation of intermittent and continuous deep-bed drying of biological materials, *Drying Technology*, Vol.12 (7), 1537-1560.

Martins, J.H.; Pinheiro Filho, J.B.; Fortes, M. e Sediyama, G.C., 1982, Simulação de secagem de milho em camada estacionária, *Rev. Bras. de Armazenamento*, Vol.7: 5-18.

Moreira, R.G. and Bakker-Arkema, F.W., 1990, Unsteaty-state simulation of a multi-stage concurrent-flow: maize dryer, *Drying Technology*, Vol.8(1), 61-75.

Parry, J. L., 1985, Mathematical modelling and computer simulation of heat and mass transfer in agricultural grain drying: A review, *J. Agric. Eng. Research*, Vol.32, 1-29.

Parti, M., 1993, Selection of mathematical models for drying grain in thin-layers, *J. Agric. Eng. Res., Vol.* 54, 339-352.

Patil, N. D., 1987, Improvement of deep-bed crossflow model by a diffusion component for the grain particle and log model for evaluation of recirculating crossflow dryer, *Drying Technology*, Vol.5(1), 87-106.

Queiroz, D.M., Dalpasquale, V.A., Pereira, J.A.M., 1984-5, Simulação de secagem de milho em secadores de fluxos concorrentes de múltiplos estágios com resfriamento em fluxos contracorrentes, *Rev. Bras. de Armazenamento*, Vol.9/10, 30-34.

Rumsey, T., 1991, Modeling moisture variability in a fixed-bed dryer, *Drying Technology*, Vol.9(1), 61-78.

Sinicio, R., Filho, J.B.P., Fortes, M. e Dalpasquale, V.A., 1986/7, Comparação de modelos matemáticos para simulação de secagem de milho a baixas temperaturas, *Rev. Bras de Armazenamento*, Vol.11 e 12(1,2), 36-42.

Shedd, C.K. , 1953, Resistence of grains and seeds to air flow, *Agr. Eng.*, Vol.34, 616-619.

Thompson, T. L., Peart, R. M. and Foster, G. H., 1968, Mathematical simulation of corn drying, *Trans. ASAE*, Vol.11, 582-586.

ABSTRACT. This work presents an analysis of fixed bed grain driers. The model involved a highly non-linear modified Darcy equation, and continuity and energy equations for humid air and grains and a thin layer drying equation. Simulations results are shown for one-dimensional, two-dimensional and axisymmetric driers. The studied axisymmetric drier is utilized in EMBRAPA for corn grain drying.

SIMULAÇÃO DE SECADORES TIPO TÚNEL

Santos, V.M.S. e Ferreira, W.R.
Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Minas Gerais
31.270-901 - Belo Horizonte - MG - Brasil

RESUMO

Apresenta-se, neste trabalho, uma técnica de modelamento de secadores de alimentos tipo túnel. O modelo é obtido dos balanços de calor e massa para o produto (frutas) e para o secador. As equações diferenciais resultantes foram resolvidas utilizando um método de integração adaptativo (Método de Bixler). Simulou-se a secagem de ameixa e os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais da literatura. A recirculação de uma parcela do ar de exaustão melhora a eficiência do secador em termos de energia.

INTRODUÇÃO

Produtos como frutas e vegetais têm um papel importante na dieta e nutrição humanas. Devido ao alto conteúdo de umidade destes alimentos, eles são altamente perecíveis. Em países tropicais como o Brasil, as perdas são estimadas em 40-50%, devido a refrigeração e congelamento inadequados (Jayaraman e Das Gupta, 1992). Vários estudos sobre secagem de frutas e vegetais têm sido desenvolvidos nos últimos anos e grandes esforços têm sido feitos no sentido de economizar o consumo de energia nos equipamentos de secagem. Uma revisão sobre os desenvolvimentos recentes e técnicas de secagem pode ser encontrada em Jayaraman e Das Gupta (1992).

Existem vários tipos de secadores utilizados na indústria de produtos alimentícios. O equipamento mais adequado para o caso de secagem de frutas e vegetais, segundo Heldman (1975), é o secador tipo túnel. Gentry et al. (1965) investigaram a capacidade de um secador tipo túnel para secagem de ameixa em duas situações: secagem em paralelo e secagem em contracorrente. Eles concluíram que a secagem em paralelo é mais eficiente em termos de capacidade mas apresenta um consumo de combustível maior que a secagem em contracorrente. Curvas de secagem de ameixa foram determinadas por Techasena et al. (1991) através da simulação de secagem em camada espessa de ameixas, e por Bertin et al.(1983-4) através de medidas experimentais.

Vários estudos foram feitos nas duas últimas décadas sobre secagem de ameixas. Bertin et al. (1978) apresentaram um modelo unidimensional de secagem baseado em balanços de massa e energia. Determinaram-se coeficientes de calor e massa, a partir de medidas em estufa de laboratório. O modelo desenvolvido neste trabalho é utilizado para simular um secador tipo túnel em escala real e os resultados obtidos são comparados favoravelmente a resultados experimentais (Bertin et al., 1980). Bertin e Blasquez (1986) utilizam o mesmo modelo desenvolvido nos dois trabalhos anteriores incluindo o efeito de contração sobre o processo de secagem. O efeito de contração volumétrica foi investigado experimentalmente por Suzuki et al. (1976), na secagem de vegetais como batata e cenoura e por Suarez e Viollaz (1991).

Neste trabalho, utilizou-se como padrão o mesmo secador estudado por Bertin et al. (1978, 1980, 1986) para simular a secagem de frutas tais como ameixa. Os objetivos básicos foram:

- Utilizar um Método de Integração Adaptativo (Método de Bixler) para resolver as equações diferenciais resultantes dos balanços de energia e massa no secador;
- Determinar as curvas de temperatura e teor de umidade do produto ao longo do túnel, para determinadas condições encontradas na prática industrial;
- Analisar o efeito da recirculação sobre o tempo de secagem;
- Comparar os resultados obtidos com resultados experimentais e numéricos existentes na literatura.

MATERIAIS E MÉTODOS

O secador. Existem vários tipos de secadores usados na desidratação de alimentos. Desrosier & Desrosier (1977) mostram quais são os tipos de secadores adequados para cada tipo de produto alimentício a ser secado. Para produtos que tenham uma estrutura sólida antes do início do processo, tais como frutas e vegetais, em geral escolhem-se métodos que utilizam prateleiras fixas (os chamados secadores de prateleiras fixas) (Heldman, 1975). Neste tipo de secador, o produto pode ser colocado sobre uma superfície (ou prateleira) e pode ser exposto ao ar aquecido, de várias maneiras. Na maioria dos casos, o parâmetro primário a ser considerado em um projeto é o tempo de secagem, embora fatores como volume de ar aquecido e distribuição de temperatura dentro do produto possam afetar o tempo de secagem.

Os secadores de prateleira fixa podem ser do tipo cabine ou do tipo túnel. Os secadores tipo cabine apresentam alguns problemas, tais como:

- dificuldade de se obter secagem uniforme do produto nos vários locais sobre as prateleiras, causada pela falta de uniformidade no escoamento do ar através destas;
- desidratação mais rápida do produto próximo à entrada de ar, pois, nas outras regiões, o produto é exposto ao ar mais úmido e, consequentemente, seca mais lentamente.

Na secagem em túnel existe também o problema de não-uniformidade na secagem do produto, em diferentes locais no túnel. Esta desvantagem pode ser minimizada utilizando uma distribuição uniforme das velocidades do ar através do túnel.

A Figura 1 mostra um secador tipo túnel que consiste de dois compartimentos, contendo um sistema de aquecimento com ventiladores e um aquecedor, e um sistema de secagem com vagonetes e prateleiras. Os vagonetes entram através de uma operação em bateladas, de maneira concorrente com o

movimento do ar. A operação em bateladas consiste em admitir, a intervalos, um vagonete na entrada enquanto o outro é descarregado na saída. Parte do ar de exaustão pode ser recirculado para dentro do aquecedor. É importante controlar a taxa de produção a fim de se obter a saída máxima.

Detalhes de construção destes secadores podem ser encontrados em Keey (1973 e 1978), Kilpatrick et al. (1955) e Gentry et al. (1965).

O modelo matemático foi baseado em uma análise física dos balanços de calor e massa em dois níveis: a) do produto e, b) do próprio secador. Deste modo, levou-se em conta as características do produto (tamanho, conteúdo de umidade, temperatura, etc.) e do secador (tamanho, vazão mássica, temperatura, umidade, etc.) (Bertin et al., 1983-4).

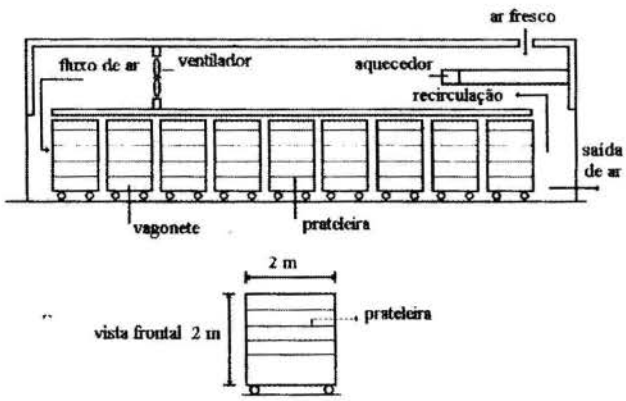


Figura 1- Secador tipo túnel com escoamento concorrente, com vagonetes e sistema de aquecimento.

O modelamento do secador em nível de produto. A figura 2 mostra o volume de controle utilizado nos balanços de energia e massa do produto.

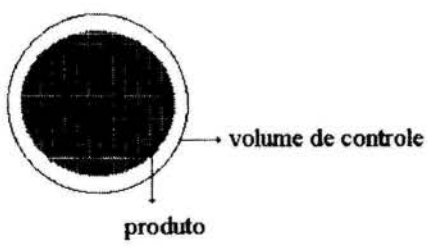


Figura 2 - Produto e volume de controle

Balanço de energia para o volume de controle:

$$\rho_{ps} C_{ps} \frac{dT_p}{dt} = B\alpha(T_a - T_{superf}) + \Delta h_v \rho_{ps} \frac{dX}{dt} \qquad (1)$$

(I) (II) (III)

em que C_{ps} é o calor específico do produto seco, T_p a temperatura do produto, T_a a temperatura do ar, T_{superf} a temperatura da superfície do produto, ρ_{ps} a densidade do produto seco, Δh_v o calor latente de vaporização, X o conteúdo de umidade do produto, α o coeficiente de transferência de calor, B a razão da superfície para o volume do produto e t o tempo.

Na Eq. (1), o termo (I) representa a taxa de acúmulo de energia no volume de controle, o termo (II) representa a taxa líquida de troca de calor por convecção e o termo (III) representa a taxa de fluxo de energia gasta na evaporação de água.

Balanço de massa para o volume de controle:

$$\rho_{ps} \frac{dX}{dt} = -B\alpha_m (p_{superf} - p_v) \qquad (2)$$

(I) (II)

em que α_m é o coeficiente de transferência de massa, p_{superf} a pressão de vapor na superfície do produto e P_v é a pressão parcial do vapor.

Na Eq. (2), o termo (I) representa a taxa de variação de massa do produto, e o termo (II) representa a taxa de evaporação da água.

Tomando-se valores médios da temperatura e do conteúdo de umidade do produto ($\overline{T}_p$ e $\overline{X}$), sobre o volume do produto, substituindo a pressão parcial do vapor por $p_v = (w / 0.622 + w)p$, em que w é o conteúdo de umidade do ar, e fazendo as seguintes suposições:

- que o produto tenha forma esférica e
- que o perfil de temperatura é parabólico na direção do raio,

obtém-se as equações que descrevem o balanço de energia e de massa para o produto:

$$(\rho_{ps} / B) C_{ps} \frac{\partial T_p}{\partial t} = \left(\alpha(T_a - T_p) + \Delta h_v (\rho_{ps} / B) \frac{dX}{dt} \right) / (1.0 + Bi / 5) \qquad (3)$$

$$(\rho_{ps} / B) \frac{d\overline{X}}{dt} = -\alpha_m \left(p_{superf} - \left(\frac{w}{0.622 + w} \right) p \right) \qquad (4)$$

e a equação para a temperatura da superfície do produto:

$$T_{superf} = \overline{T}_p + (Bi / 5\alpha)(\rho_{ps} C_{ps} / B) \frac{d\overline{T}_p}{dt} \qquad (5)$$

em que Bi o número de Biot.

A pressão na superfície do produto, P_{superf}, pode ser estimada a partir de T_{superf} e $\overline{X}$, através das seguintes expressões:

$$p_{superf} = p_{sat}\big|_{T_{superf}} d_w(\overline{X}) \qquad (6)$$

$$d_w = 0.4\overline{X} + 0.48 \text{ para } \overline{X} \le 1.3 \text{ e } d_w = 1.0 \text{ para } \overline{X} \ge 1.3 \qquad (7)$$

em que $p_{sat}\big|_{T_{superf}}$ é a pressão de saturação do vapor d'água à temperatura da superfície; d_w é o coeficiente de desorção.

No início da secagem as condições iniciais são:

$$\overline{T}_p = T_{p_i}, \quad \overline{X} = X_i \quad e \quad T_{superf} = T_{superf_i}$$

O modelamento do secador em nível de secador. A figura 3 mostra o volume de controle utilizado nos balanços de energia e massa para o secador.

Os balanços de energia para o ar e para o produto são, respectivamente:

Balanço de energia para o ar:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{as}(C_{as}T_a + w\Delta h_v)\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{as}(C_{as}T_a + w\Delta h_v)v\right] = -\alpha A(T_a - T_p) - \rho_{ps}\frac{dX}{dt}\Delta h_v \qquad (8)$$

em que ρ_{as} é a densidade do ar seco, C_{as} é o calor específico do ar seco, v é a velocidade do ar e A é área de transferência de calor.

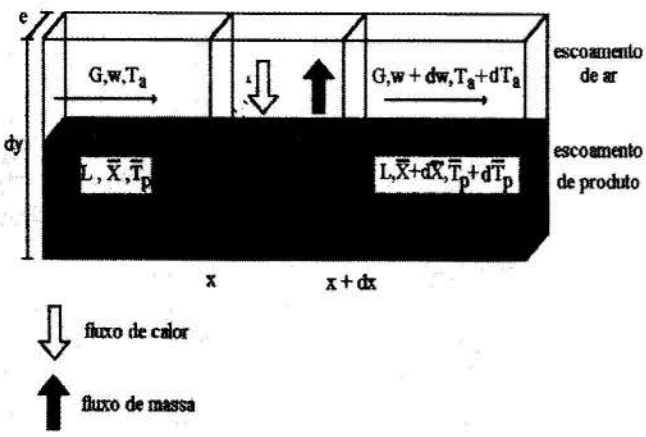


Figura 3 - Esquema mostrando os balanços de energia e de massa entre os fluxos de ar e de produto no secador tipo túnel.

Na Eq. (8) o termo (I) representa a taxa de acúmulo de energia no volume de controle, o termo (II) representa a taxa líquida de saída de energia através da superfície de controle, o termo (III) representa a taxa de calor transferido para o produto por convecção e o termo (IV) representa a taxa de energia transferida do produto para o ar.

Balanço de energia para o produto:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{ps}(C_{ps}+C_1X)T_p\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{ps}(C_{ps}+C_1X)uT_p\right]= \alpha A(T_a-T_p)+\rho_{ps}\frac{dX}{dt}\Delta h_v \tag{9}$$

em que C_1 é o calor específico da água e u é a velociade do vagonete.

Na Eq. (9) o termo (I) representa a taxa de acúmulo de energia no produto, o termo (II) representa a taxa líquida de saída de energia através da superfície de controle, o termo (III) representa a taxa de calor transferido do ar para o produto por convecção e o termo (IV) representa a taxa de energia transferida do produto para o ar.

Somando as equações (8) e (9), obteremos a equação que descreve o balanço de energia em nível do secador:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{as}(C_{as}T_a+w\Delta h_v)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{as}(C_{as}T_a+w\Delta h_v)v\right]+ \frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{ps}(C_{ps}+C_1X)T_p\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{ps}(C_{ps}+C_1X)uT_p\right]=0 \tag{10}$$

com $\Delta h_v = \Delta h_{v0} + C_vT_a$, onde Δh_{v0} é o calor latente de vaporização à temperatura de zero grau Celsius, C_v é o calor específico do vapor d'água.

Então temos que:

$$w\Delta h_v = w\Delta h_{v0} + wC_vT_a \tag{11}$$

Substituindo a expressão (11) na equação (10), obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{as}(C_{as}T_a+w\Delta h_{v0}+wC_vT_a)\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{as}(C_{as}T_a+w\Delta h_{v0}+wC_vT_a)v\right] +\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{ps}(C_{ps}+C_1X)T_p\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{ps}(C_{ps}+C_1X)uT_p\right]=0 \tag{12}$$

Seja :

$$C_{au} = C_{as} + wC_v \qquad C_{pu} = C_{ps} + XC_1 \tag{13}$$

onde C_{au} é o calor específico do ar úmido e C_{pu} é o calor específico do produto úmido.

Substituindo as expressões para o calor específico do ar úmido e calor específico do produto úmido na equação (12) obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{as}(C_{au}T_a+w\Delta h_{v0})\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{as}(C_{au}T_a+w\Delta h_{v0})v\right] +\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho_{ps}C_{pu}T_p\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_{ps}C_{pu}uT_p\right]=0 \tag{14}$$

Seja :

$$G = \rho_{as}v \tag{15}$$

$$L = \rho_{ps}u \tag{16}$$

em que G é o fluxo de massa de ar seco e L é o fluxo de massa de produto seco.

Substituindo as expressões para o fluxo de massa de ar seco e fluxo de massa de produto seco na equação (14) e dividindo a equação (17) pelo volume, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{G}{v}(C_{au}T_a+w\Delta h_{v0})\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{G}{v}(C_{au}T_a+w\Delta h_{v0})v\right] +\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{L}{u}C_{pu}T_p\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{L}{u}C_{pu}uT_p\right]=0 \tag{17}$$

De acordo com Bertin & Blazquez (1986), a velocidade instantânea do produto, u, pode ser considerada desprezível se comparada a velocidade do ar. O fluxo de massa de produto seco, L, na equação (17) é então dividida por $\overline{u}$, que é a razão entre o comprimento do secador para o tempo de secagem global. Considerando desprezíveis as variações de velocidade, a equação (17) pode ser reescrita como:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{G}{v}(C_{au}T_a+w\Delta h_{v0})\right]+\left(\frac{\partial}{\partial t}+u\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{L}{u}C_{pu}T_p\right]=0 \tag{18}$$

Os balanços de massa para o ar e para o produto são, respectivamente:

$$\underset{(I)}{\frac{\partial}{\partial t}[\rho_{as}w]}+\underset{(II)}{\nabla[\rho_{as}vw]}=\underset{(III)}{-\rho_{ps}\frac{\partial X}{\partial t}} \tag{19}$$

e

$$\underset{(IV)}{\frac{\partial}{\partial t}[\rho_{ps}X]}+\underset{(V)}{\nabla[\rho_{ps}uX]}=\underset{(VI)}{\rho_{ps}\frac{\partial X}{\partial t}} \tag{20}$$

Na Eq. (19) o termo (I) representa a taxa de acúmulo de umidade no volume de controle, o termo (II) representa a taxa

líquida de saída de umidade através da superfície de controle e o termo (III) representa a taxa de umidade cedida pelo produto no volume de controle. Na Eq.(20) o termo (IV) representa a taxa de acúmulo de umidade no volume de controle, o termo (V) representa a taxa líquida de saída de umidade através da superfície de controle e o termo (VI) representa a taxa de umidade cedida pelo produto no volume de controle.

Somando as equações (19) e (20), obtemos a equação que descreve o balanço de massa em nível de secador:

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_{as}w]+\frac{\partial}{\partial x}[\rho_{as}vw]+\frac{\partial}{\partial t}[\rho_{ps}X]+\frac{\partial}{\partial x}[\rho_{ps}uX]=0 \qquad (21)$$

Substituindo as expressões (15) e (16) na equação (21), e dividindo pelo volume, obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{G}{v}w\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{G}{v}vw\right]+\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{L}{u}X\right]+\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{L}{u}uX\right]=0 \qquad (22)$$

A equação (22) pode ser reescrita como:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{G}{v}w\right]+\left(\frac{\partial}{\partial t}+u\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{L}{\bar{u}}X\right]=0 \qquad (23)$$

Tomando-se valores médios da temperatura e do conteúdo de umidade do produto ($\overline{T}_p$ e $\overline{X}$),sobre o volume do produto, as equações (18) e (23) tornam-se:

$$\underset{(I)\ (i)}{\left(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{G}{v}(C_{au}T_a+w\Delta h_{v0})\right]}+\underset{(II)\ (ii)}{\left(\frac{\partial}{\partial t}+u\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{L}{\bar{u}}C_{pu}\overline{T}_p\right]}=0 \qquad (24)$$

$$\underset{(III)\ (iii)}{\left(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{G}{v}w\right]}+\underset{(IV)\ (iv)}{\left(\frac{\partial}{\partial t}+u\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{L}{\bar{u}}\overline{X}\right]}=0 \qquad (25)$$

Estas últimas equações têm a forma clássica do caso geral de fluxo bifásico. As velocidades têm valores positivos em fluxos concorrentes e sinais opostos em fluxos contracorrente. Em operações em bateladas, os termos (ii) e (iv) são nulos. Para secadores contínuos e estacionários, as condições (I) a (IV) são nulas.

No caso deste trabalho, foi utilizada a teoria dos secadores descontínuos na qual supõe-se entrada contínua dos vagonetes. O número de vagonetes dentro do secador é tal que eles ocupam sempre todo o comprimento do secador. As Eqs. (24) e (25) ficam:

$$\frac{dT_a}{dx}=(L/G)\left(\Delta h\frac{d\overline{X}}{dx}-C_{pu}\frac{d\overline{T}_p}{dx}\right)/C_{au} \qquad (26)$$

$$\frac{dw}{dx}=(-L/G)\frac{d\overline{X}}{dx} \qquad (27)$$

em que $\Delta h=\Delta h_{v0}+C_vT_a-C_l\overline{T}_p$

Se levarmos em conta as equações (3) e (4) e o fato de que, em operações contínuas, x é proporcional ao tempo, obtém-se:

$$(\rho_{ps}/B)C_{ps}\frac{d\overline{T}_p}{dx}=\left(\alpha(T_a-\overline{T}_p)+\Delta h_v(\rho_{ps}/B)\frac{d\overline{X}}{dx}\right)/(1{,}0+Bi/5) \qquad (28)$$

$$(\rho_{ps}/B)\frac{dX}{dx}=-\alpha_m\left(p_{sup\,erf}-\left(\frac{w}{0{,}622+w}\right)p\right) \qquad (29)$$

$$\frac{dT_a}{dx}=(L/G)\left(\Delta h\frac{dX}{dx}-C_{pu}\frac{dT_p}{dx}\right)/C_{au} \qquad (30)$$

$$\frac{dw}{dx}=(-L/G)\frac{d\overline{X}}{dx} \qquad (31)$$

em que:

$$T_{sup\,erf}=\overline{T}_p+(Bi/5\alpha)(\rho_{ps}C_{ps}/B)\frac{d\overline{T}_p}{dx} \qquad (32)$$

e as condições iniciais são:

$$\overline{T}_p=T_{p_i}\ ,\ \overline{X}_t=X_i\ ,\ T_a=T_{ai}\ ,\ w=w_i\ \text{ e }\ T_{superf}=T_{superf_i}$$

PROCEDIMENTO NUMÉRICO

As equações de balanço foram resolvidas numericamente utilizando um Método de Integração Adaptativo chamado *Método de Bixler* (1980). Esse método usa a técnica de Predição-Correção e uma variante mais sofisticada da Regra Trapezoidal. No presente trabalho, este método foi aplicado separadamente a cada equação sendo o critério de avanço espacial, o menor valor de Δx obtido, dentro dos n valores de Δx obtidos. A fórmula de correção foi resolvida aplicando-se uma única iteração do Método de Substituição Sucessivas.

RESULTADOS E CONCLUSÕES

A simulação da secagem de ameixa em secador tipo túnel foi feita levando-se em conta as condições limites para preservação da qualidade do produto quais sejam:

- o conteúdo final de água no produto não deve ser menor que 0,3 kg/kg base seca;
- a temperatura das frutas não deve exceder 74°C.

Considerou-se que o ar fresco estava a 25°C e 60% de umidade relativa, o que corresponde a uma umidade absoluta de 0,014 kg de vapor/ kg de ar seco. O ar de entrada do secador foi, então, misturado com uma fração do ar de exaustão e aquecido até 87°C. A fração de ar recirculado foi chamada nesse trabalho de RR. Nas simulações feitas, considerou-se 78% de recirculação, de forma que o ar entrando no secador tivesse uma umidade relativa de 11%, para que os resultados pudessem ser comparados com os da literatura.

As variáveis que podem ser controladas são: temperatura, velocidade e umidade relativa do ar de entrada; a massa de produto por vagonete; a velocidade do vagonete e o comprimento do secador (equivalente ao número de vagonetes).

Para a simulação foi considerado carregamento contínuo.

As Figuras 4 e 5 mostram a distribuição de temperatura do ar e do produto, e do conteúdo de umidade do produto ao longo do comprimento do secador. Comparam-se os resultados da simulação com dados experimentais de Bertin et al. (1986). Na Fig.4, mostram-se os resultados de simulação utilizando o método de Bixler e na Fig. 5 os resultados de simulação utilizando o método de Euler.

O método de Bixler apresentou um desvio menor, em relação aos dados experimentais comparado com o método de Euler. Além disso, o método de Bixler necessita de um número muito menor de iterações para atingir a convergência. O tempo computacional é também muito menor quando se utiliza o método de Bixler.

A comparação entre os resultados da simulação e os dados experimentais permite concluir que o método proposto para a resolução do sistema de equações fornece resultados acurados dentro da precisão das medidas experimentais.

As Figuras 6 e 7 mostram o efeito do tamanho da fruta sobre a distribuição de temperatura e conteúdo de umidade ao longo da secagem. Pode-se observar que o tamanho da fruta não afeta a distribuição de temperatura, mas afeta a distribuição do conteúdo de umidade.

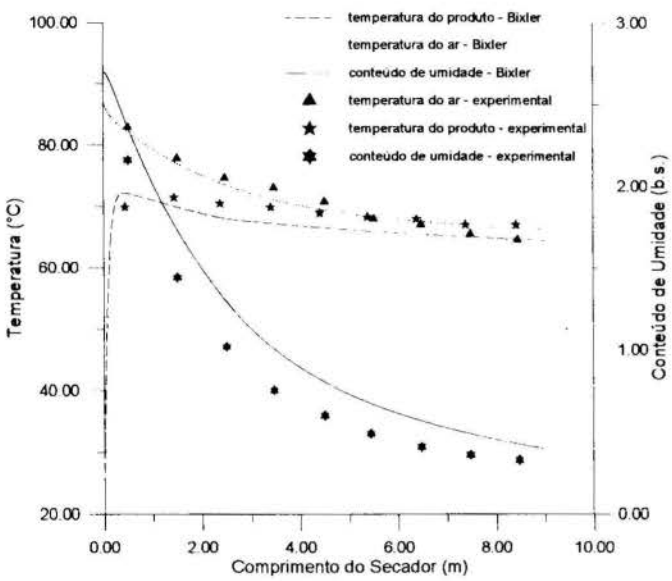


Figura 4 - Distribuição de temperatura do ar (T_a), temperatura do produto ($\overline{T}_p$) e conteúdo de umidade ($\overline{X}$) versus comprimento do secador.

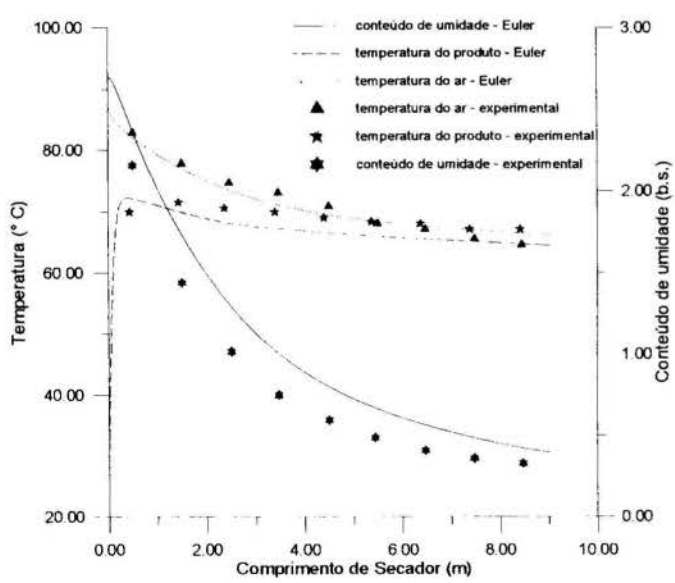


Figura 5 - Distribuição de temperatura do ar (T_a), temperatura do produto ($\overline{T}_p$) e conteúdo de umidade ($\overline{X}$) versus comprimento do secador.

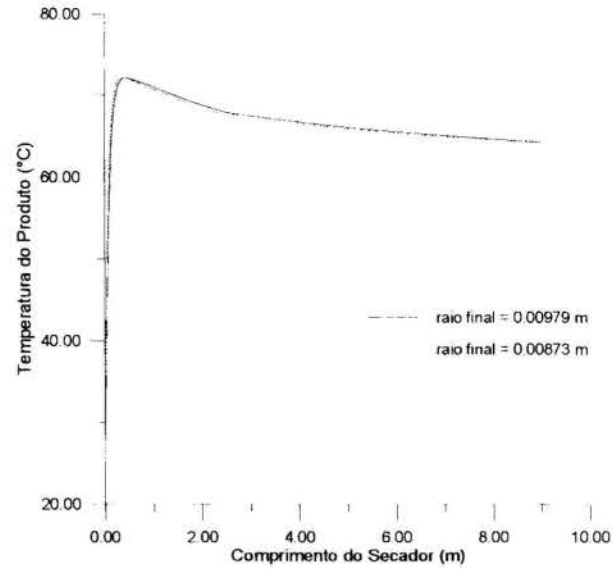


Figura 6 - Efeito do tamanho da fruta sobre a distribuição de temperatura ao longo do comprimento do secador.

As Figuras 8 e 9 mostram o efeito da recirculação do ar sobre a distribuição de temperatura e de conteúdo de umidade do produto. Uma recirculação RR=0% corresponde ao caso em que o ar fresco, com umidade absoluta de 0,014 kg de vapor/kg de ar seco é aquecido a 87^{0}C entrando, portanto, no secador altamente seco.

A recirculação é recomendada porque o ar altamente seco, na entrada do secador, pode danificar a qualidade da fruta (Bertin et al., 1986).

Observa-se, nas Figs.8 e 9, que quanto maior é a razão de recirculação, mais lenta é a secagem e menor é a temperatura máxima atingida pelo produto. Do ponto de vista da qualidade da fruta, este comportamento é bom. Além disto, a recirculação permite uma economia de energia no aquecimento do ar antes de entrar na zona de secagem.

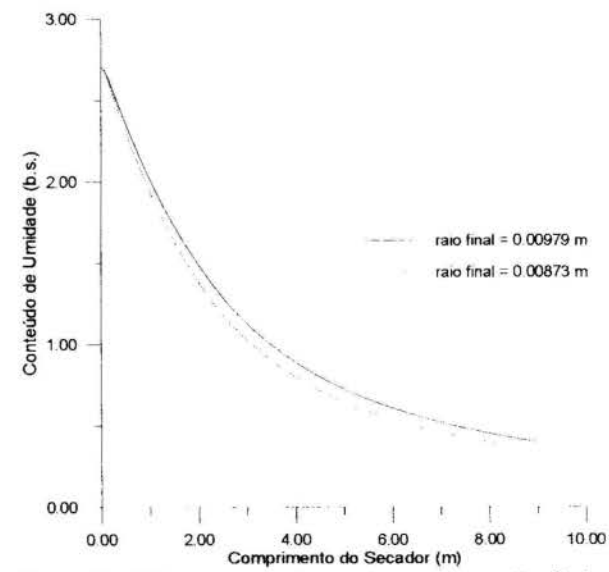


Figura 7 - Efeito do tamanho da fruta sobre a distribuição do conteúdo de umidade ao longo do comprimento do secador..

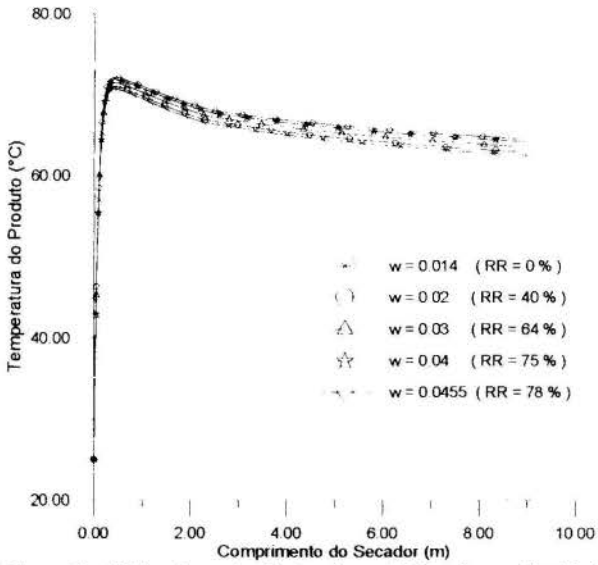


Figura 8 - Efeito da recirculação do ar (RR) sobre a distribuição de temperatura do produto ao longo do comprimento do secador..

CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi apresentada uma técnica de modelamento de secadores de alimentos tipo túnel. Desenvolveu-se uma técnica de resolução das equações diferenciais de balanço que utiliza um método de integração adaptativo (Método de Bixler). A solução pelo método adaptativo mostrou-se mais eficiente que o método clássico de Euler, em termos de números de iterações e de tempo de computador. Os resultados obtidos foram comparados favoravelmente com dados experimentais da literatura. Analisou-se o efeito da recirculação do ar de exaustão e verificou-se que a recirculação evita a deterioração da qualidade da fruta, além de reduzir o custo de energia no pré-aquecimento do ar de secagem.

Analisou-se o efeito do tamanho da fruta sobre a distribuição de temperatura e de conteúdo de umidade ao longo do comprimento do secador.

O modelo pode facilmente ser adaptado para estudos de secadores de geometria complexa.

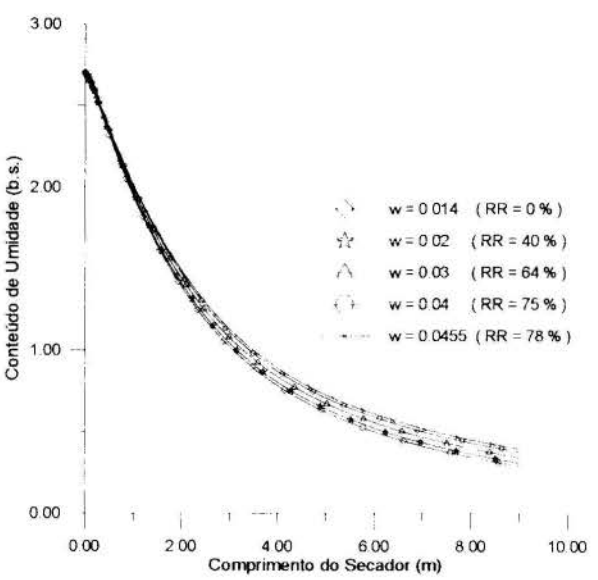


Figura 9 - Efeito da recirculação de ar (RR) sobre a distribuição do conteúdo de umidade ao longo do comprimento do secador..

AGRADECIMENTOS - Os autores agradecem o suporte financeiro fornecido pelo CNPq (Conselho Nacional para o Desenvolvimento Científico e Tecnológico).

BIBLIOGRAFIA

Bertin, R. & Blazquez, M., 1986, "Modeling and Optimization of Dryer", *Drying Technology*, Vol.4(1): 45-66.

Bertin, R., Delage, P. & Boverie, S., 1983-84, "Estimation of Functions in Drying Equations", *Drying Technology*, Vol.2(1): 45-59.

Bertin, R., Pierronne, F. & Combarnous, M., 1976, "Modélisation et Simulation du Séchage des Fruits en Tunnel", *Industries Alimentaires et Agricoles*, Vol.93: 1431-1436.

Bertin, R., Pierronne, F. & Combarnous, M., 1980, "Modeling and Simulating a Distributed Parameter Tunnel Drier", *Journal Food Science*, Vol.45: 122-125,137.

Bertin, R., Pierronne, F. & Combarnous, M., 1978, "Détermination des Paramètres de Séchage de Certains Fruits Compacts", *Ann. Technol. Agric.*, 27(2): 489-500.

Bixler, N. E., 1981, "An Improved Time Integrator for Finite Elements Analysis", *Comm.in Applied Numerical Methods*, Vol.5: 69-78.

Cazaubon, C., Bertin, R. & Blazquez, M., 1980, "Toward Automatic Control by Microprocessor for Convective Dryer Systems", P. 107-111. In: Mujumdar, (Ed.) *Proceeding 2nd Symposium on Drying*, Hemisphere, New York, Ny.

Desroier, N. W. & Desroier, J. N., 1977, "The Technology of Food Preservation", 4th Edition, Avi Publ. Co., Westport, Ct.

Gentry, J. P., Miller, M. W. & Claypool, L. L., 1965, "Engineering and Fruit Quality Aspects of Prune Dehydration in Parallel and Counter Flow Tunnel", *Food Technology*, Vol.19(9): 122-125.

Jayaraman, K. S. & Das Gupta, D. K., 1992, "Dehydration of Fruits and Vegetables - Recent Developments in Principles and Techniques", *Drying Technology*, Vol.10(1): 1-50.

Heldman, D. R., 1975, *Food Process Engineering*, Avi Publ. Co., Westport, Ct.

Keey, R. B., 1973, *Drying, Principles and Practice*, Pergamon Press, Oxford.

Keey, R. B., 1978, *Introduction to Industrial Drying Operation*, Pergamon Press, Oxford.

Kilpatrick, P. W., Lowe, E. & Van Arsdel, W. B., 1955, "Tunnel Dehydrators for Fruits and Vegetable", *Advance in Food Research*, Vol.6: 314-359.

Suarez, C. & Viollaz, P. E., 1991, "Skrinkage Effect on Drying Behavior of Potato Slabs", *Journal of Food Engineering*, Vol.13: 103-114.

Suzuki, K., Kubota, K., Hasegawa, T. & Hosaka, H., 1976, "Shrinkage in Dehydration of Root Vegetables", *J. Food Sci.*, Vol. 41: 1189-1193.

Techasena, O., Lebert, A. M. & Bimbenet, J. J., 1991, "Simulation of Plum Drying in Deep Bed", *Drying Technology*, Vol.9(4): 947-971.

ABSTRACT - This work presents a modeling of tunel driers. The model is obtained from the heat and mass transfer balances at two levels, the product (fruits) level and inside the tunel itself. The governing equations were solved by an adaptive integration method (Bixler method). Prune drying simulations are made and results are compared with experimental data available in literature. Recirculation of a proportion of the exhaust air improves the dryer efficiently in terms of energy.

ABCM

ESTUDO PRELIMINAR SOBRE A SECAGEM DE MEIOS POROSOS CAPILARES

Luís A. Calçada[1], Marcelo G. G. Mazza[2] e Giulio Massarani[1]
(1) PEQ/COPPE/UFRJ C. P. 68502, CEP 21945-970, Rio de Janeiro-RJ-Brasil
(2) DTQ/IT/UFRRJ C.P. 74501, CEP 23851-970, Seropédica, RJ-Brasil

RESUMO

Dando continuidade aos estudos desenvolvidos pelo PEM/COPPE sobre a Teoria de Luikov para descrever a secagem de meios capilares, é construída uma célula de medidas que permite levantar os perfis de temperatura e umidade num cilindro em diferentes condições operacionais. A experiência caracteriza-se pelo emprego da técnica gravimétrica na medida da umidade média da amostra. Na continuação do trabalho será usado uma técnica não-invasiva (raios gama) na medida do perfil de umidade do corpo cilíndrico poroso.

INTRODUÇÃO

A transferência simultânea de calor e massa em meios porosos capilares é um problema com ampla aplicação, tecnológica. Luikov (1966) utiliza princípios da termodinâmica de processos irreversíveis para estabelecer os balanços de massa e energia na matriz porosa, desprezando o efeito do campo gravitacional, de reações químicas e variações geométricas na matriz porosa. Neste equacionamento são considerados os efeitos cruzados da umidade e temperatura na transferência de calor e massa. Liu (1990), Liu (1991) e Lewis e Ferguson (1989) apresentam métodos analíticos e numéricos para a obtenção de soluções do modelo de Luikov. O PEM/COPPE/UFRJ tem desenvolvido alguns trabalhos nessa área, procurando soluções analíticas e analíticas-numéricas para o problema. Ribeiro e Cotta (1993) utilizaram a Técnica da Transformada Integral Generalizada (TTIG) para a obtenção de soluções analíticas. Guigon (1995) fez um estudo das soluções exata e aproximadas das equações de Luikov para a análise da secagem, utilizando técnicas como a de parâmetros concentrados para a obtenção de soluções aproximadas e a TTIG para obtenção da solução exata.

O presente trabalho tem como objetivo dar continuidade aos trabalhos desenvolvidos pelo PEM. Em uma primeira fase foi construído um sistema experimental que possibilita a obtenção de estimativas para os coeficientes de transferência de calor e massa com base em valores médios medidos para a umidade e temperatura na secagem de meios capilares.

MATERIAIS E MÉTODOS

A Figura 1 apresenta o sistema experimental que foi construído de forma a permitir várias configurações operacionais. O aquecimento do ar é feito por resistências elétricas localizadas na sucção do soprador e os perfis de velocidade do fluido são levantados com o auxílio de um "pitot". Os meios porosos utilizados são constituídos por esferas de vidro consolidadas pela adição de 5 % em massa de adesivo epoxi

A Figura 2 apresenta a vista lateral da unidade de secagem e a vista superior da câmara de evaporação.

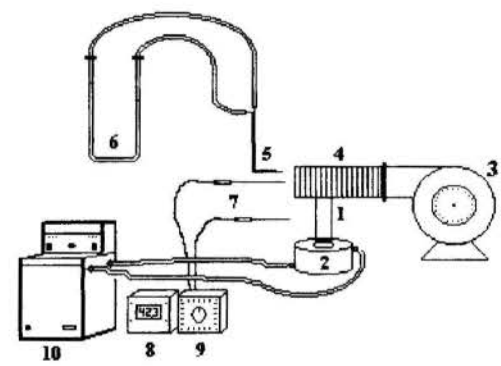


Figura 1 - Unidade de Secagem (1 - amostra, 2 - placa de aquecimento, 3 - soprador, 4 - câmara de evaporação, 5 - tubo de Pitot, 6 - manômetro de água, 7 - termopares, 8 - indicador de temperatura, 9 - chave seletora e 10 - banho termostático.).

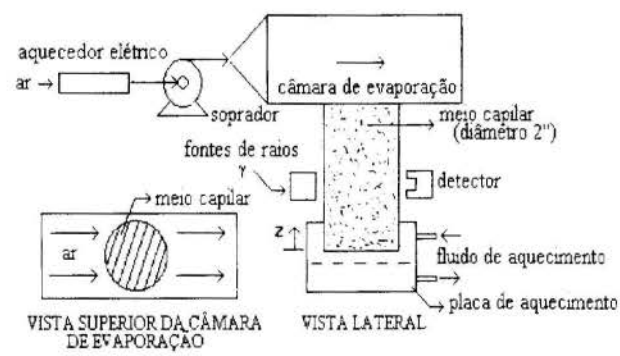


Figura 2 - Vista lateral da unidade de secagem e vista superior da câmara de evaporação.

A face superior da amostra está em contato com um fluxo de ar tangencial. Com relação à base inferior da amostra são possíveis os seguintes casos:

- **caso (1)**: a base da amostra encontra-se livre, permitindo a troca de calor e massa com o ambiente;

- **caso (2)**: na base da amostra existe um sistema de vedação que impede a transferência de calor e massa com o ambiente;

- **caso (3)**: a base da amostra encontra-se conectada a um sistema de aquecimento com temperatura controlada, permitindo a troca de calor com o sistema.

Preliminarmente foram realizados experimentos com um meio de geometria cilíndrica de 30 mm de comprimento e 50 mm de diâmetro. Nesse caso, registrou-se , com termopares, a temperatura e a umidade média da amostra (base seca), utilizando em relação a última a técnica gravimétrica. Esta técnica consiste basicamente na pesagem da amostra úmida e seca.

Em uma segunda fase, que encontra-se em desenvolvimento, serão levantados os perfis de umidade e temperatura ao longo da direção axial de um meio cilíndrico longo. Os perfis de temperatura serão medidos com termopares e os perfis de umidade serão levantados com auxílio de uma técnica não-invasiva utilizando raios gamas (Gubulin, 1977 e Northfleet, 1980).

RESULTADOS EXPERIMENTAIS

Nesta etapa do trabalho foram registrados valores médios de umidade e temperatura, como descrito anteriormente. Os dados relativos à realização dos experimentos encontram-se na Tabela 1.

Tabela 1 - Dados relativos aos experimentos realizados

VARIÁVEL	DESCRIÇÃO
Geometria da Amostra (mm)	L = 30 e D = 50
Porosidade	$\varepsilon = 0{,}35$
Densidade Aparente do Meio Seco	$\rho = 1510\ kg/m^3$
Permeabilidade	$k = 4{,}6\ 10^{-10}\ m^2$
Velocidade do Ar na Câmara	$v_{ar} = 9{,}5\ m/s$
Propriedades do Ar	$U_{ar} = 0{,}010$ e UR = 50%
Umidade do Sólido em Equilíbrio com o Ar	$U^* \cong 0{,}0$
Calor Específico do Meio Seco	$C = 1093 \cdot \varepsilon + 736 \cdot (1 - \varepsilon)$ [J/(kg°C)]

A Tabela 2 apresenta a análise granulométrica das esferas de vidro utilizadas no leito.

Tabela 2 - Análise granulométrica das esferas de vidro.

Sistema Tyler	Abertura D # (mm)	Fração em massa < D #
+ 20	0,841	0,999
- 20 + 28	0,595	0,576
- 20 + 28	0,420	0,257
- 28 + 35	0,297	0,025
- 48		

A permeabilidade e a porosidade dos meios capilares foram determinadas através de ensaios de permeametria e de picnometria (dados apresentados na Tabela 1).

Com base na teoria do modelo capilar, Borges e Massarani (1987) e Massarani (1989), é possível estimar a área específica e o diâmetro médio dos poros.

$$S_w = 26\ cm^2/g \quad e \quad \overline{D}_{poro} = 478\ \mu m.$$

As Figuras 3, 4 e 5 são relativas aos experimentos preliminares realizados nas condições descritas nos casos (1) e (2) e as Figuras 6, 7 e 8 são relativas ao caso (3). Nas figuras que seguem, Γ é a taxa de secagem $[ML^{-3}T^{-1}]$, o traço sobre a variável define o valor médio da variável e o subscrito "max" o valor máximo da variável.

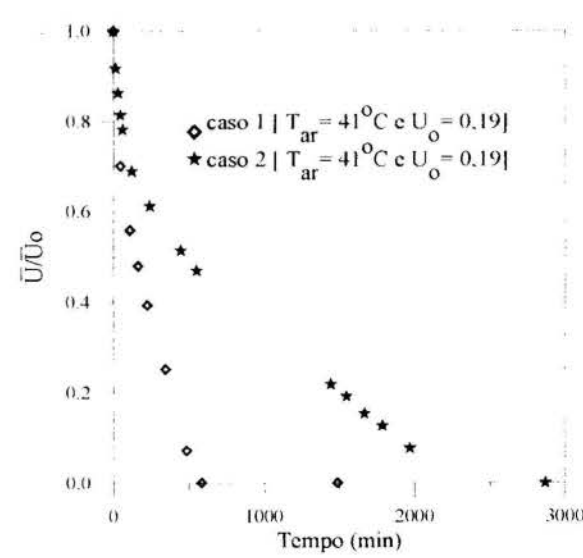


Figura 3 - Perfis de umidade média.

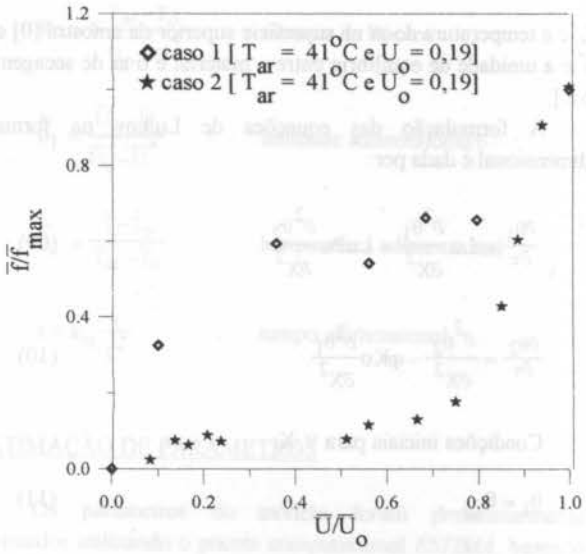


Figura 4 - Taxa de secagem média .

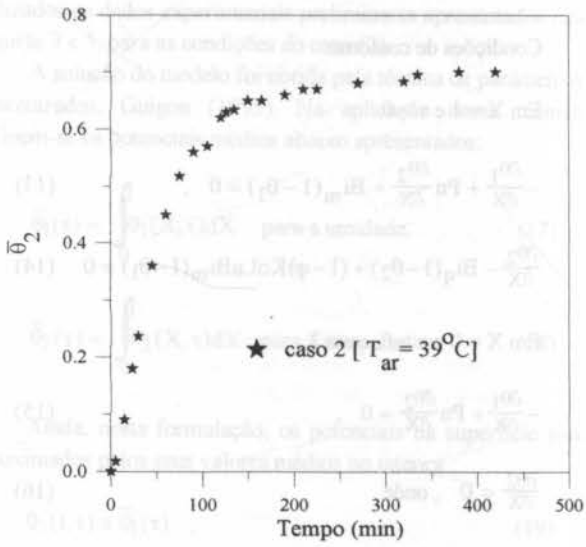


Figura 5 - Perfil de temperatura média.

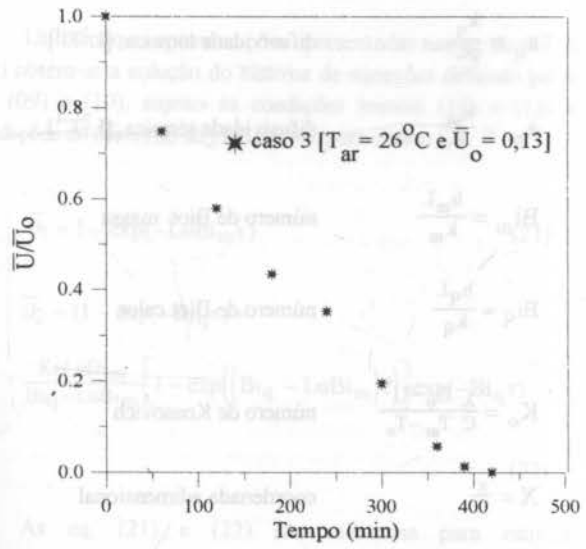


Figura 6 - Perfil de umidade média.

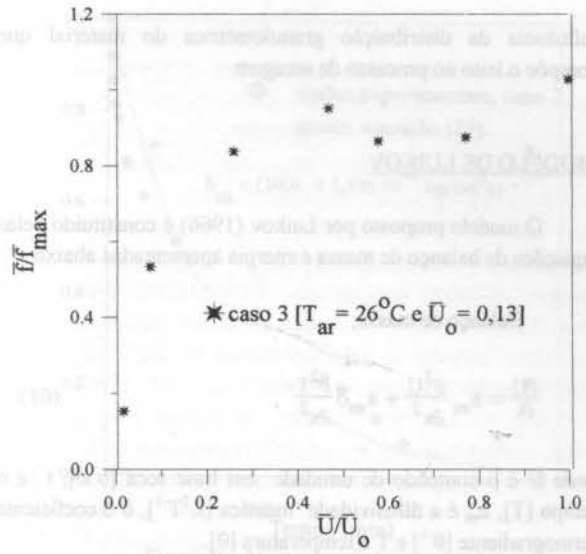


Figura 7 - Taxa de secagem média.

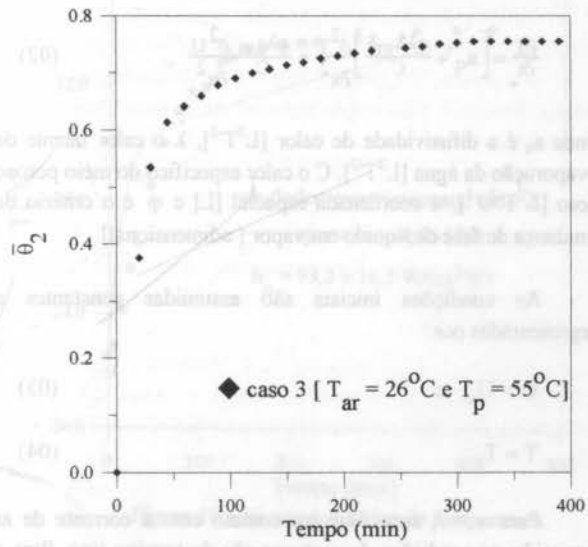


Figura 8 - Perfil de temperatura média.

ANÁLISE DE RESULTADOS

A taxa média de secagem é obtida da curva de umidade média por diferenciação.

Para os casos 1 e 2 , Figuras 3 e 4, a taxa média apresenta três periodos distintos: (1) taxa decrescente, (2) taxa constante e (3) decrescente.

Nas Figuras 3 e 4 observa-se que para o caso 1 a taxa de secagem apresenta valores superiores quando comparada com os valores de taxa nas condições do caso 2.

A temperatura média do meio, Figuras 5 e 8, tende a um valor assintótico, como era de se esperar. É importante ressaltar que a amostra está termicamente isolada do ambiente.

Como este trabalho tem carater preliminar, os dados apresentados não são suficientes para uma análise criteriosa das variáveis que influenciam os processos de transferência de calor e massa. Futuramente serão realizados novos experimentos com a finalidade de avaliar o efeito da temperatura do ar de secagem, temperatura da placa, velocidade do ar de secagem e a

influência da distribuição granulométrica do material que compõe o leito no processo de secagem.

MODELO DE LUIKOV

O modelo proposto por Luikov (1966) é constituido pelas equações de balanço de massa e energia apresentadas abaixo.

Balanço de massa:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a_m \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + a_m \delta \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \qquad (01)$$

onde U é o conteúdo de umidade em base seca [b.s.], t é o tempo [T], a_m é a difusividade mássica $[L^2T^{-1}]$, δ o coeficiente termogradiente $[\theta^{-1}]$ e T a temperatura $[\theta]$.

Balanço de energia:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \left[a_q + \frac{\varphi \lambda a_m \delta}{C} \right] \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\varphi \lambda a_m}{C} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad , \qquad (02)$$

onde a_q é a difusividade de calor $[L^2T^{-1}]$, λ o calor latente de evaporação da água $[L^2T^{-2}]$, C o calor específico do meio poroso seco $[L^2T^{-2}\theta^{-1}]$, x coordenada espacial [L] e φ é o critério de mudança de fase de líquido em vapor [adimensional].

As condições iniciais são assumidas constantes e representadas por:

$$U = U_o \quad e \qquad (03)$$

$$T = T_o \quad . \qquad (04)$$

Para x = *l*, superfície em contato com a corrente de ar aquecido, as condições de contorno são do terceiro tipo. Para a superfície em x = 0, base inferior da amostra, as condições de contorno utilizadas neste estudo preliminar correspondem ao caso (2) acima mencionado:

x = *l* e t > 0:

$$k_m \frac{\partial U}{\partial x} + k_m \delta \frac{\partial T}{\partial x} + h_m (U - U^*) = 0 \quad . \qquad (05)$$

$$k_q \frac{\partial T}{\partial x} + h_q (T - T_a) + (1 - \varphi) \lambda h_m (U - U^*) = 0 \qquad (06)$$

x = 0 e t > 0:

$$k_q \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad , \qquad (07)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \delta \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad , \qquad (08)$$

onde *l* é o comprimento da amostra [L], k_m é a condutividade mássica $[ML^{-1}T^{-1}]$, k_q é a condutividade térmica $[MLT^{-3}\theta^{-1}]$, h_m é o coeficiente convectivo de transferência de massa $[ML^{-2}T^{-1}]$, h_q é o coeficiente convectivo de transferência de calor $[MT^{-3}\theta^{-1}]$, T_a é a temperatura do ar na superfície superior da amostra $[\theta]$ e U^* é a umidade de equilíbrio entre o material e o ar de secagem [b.s.].

A formulação das equações de Luikov na forma adimensional é dada por:

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = Lu \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial X^2} - LuPn \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial X^2} \qquad (09)$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial X^2} - \varphi Ko \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial X^2} \qquad (10)$$

Condições iniciais para $\forall$ X:

$$\theta_1 = \theta_{1_o} \quad . \qquad (11)$$

$$\theta_2 = \theta_{2_o} \qquad (12)$$

Condições de contorno:

Em X = 1 e $\tau > 0$

$$-\frac{\partial \theta_1}{\partial X} + Pn \frac{\partial \theta_2}{\partial X} + Bi_m (1 - \theta_1) = 0 \quad , \qquad (13)$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial X} - Bi_q (1 - \theta_2) + (1 - \varphi) KoLuBi_m (1 - \theta_1) = 0 \quad . \qquad (14)$$

Em X = 0 e $\tau > 0$, caso 2

$$-\frac{\partial \theta_1}{\partial X} + Pn \frac{\partial \theta_2}{\partial X} = 0 \quad , \qquad (15)$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial X} = 0 \quad , \text{onde} \qquad (16)$$

sendo definidas as seguintes variáveis:

$a_q = \frac{k_q}{\rho C}$	difusividade térmica, $[L^2T^{-1}]$
$a_m = \frac{k_m}{\rho}$	difusividade térmica, $[L^2T^{-1}]$
$Bi_m = \frac{h_m L}{k_m}$	número de Biot massa
$Bi_q = \frac{h_q L}{k_q}$	número de Biot calor
$K_o = \frac{\lambda}{C} \frac{U_o - U^*}{T_{ar} - T_o}$	número de Kossovich
$X = \frac{x}{L}$	coordenada adimensional
$Lu = \frac{a_m}{a_q}$	número de Luikov

$$Pn = \delta \frac{T_{ar} - T_o}{U_o - U^*}$$ número de Posnov

$$\overline{\theta}_1 = \frac{\overline{U}_o - \overline{U}}{\overline{U}_o - \overline{U}^*}$$ umidade adimensional

$$\overline{\theta}_2 = \frac{\overline{T} - \overline{T}_o}{\overline{T}_{ar} - \overline{T}_o}$$ temperatura adimensional

$$\tau = a_q \frac{t}{L^2}$$ tempo adimensional

ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS

Os parâmetros do modelo foram preliminarmente estimados utilizando o pacote computacional *ESTIMA*, baseado no método da máxima verossimilhança, desenvolvido pelo PEQ/COPPE/UFRJ (Pinto et al. (1991)). Nesta tarefa foram utilizados os dados experimentais preliminares apresentados nas Figuras 3 e 5, para as condições do caso (2).

A solução do modelo foi obtida pela técnica de parâmetros concentrados, Guigon (1995). Na aplicação dessa técnica definem-se os potenciais médios abaixo apresentados:

$$\overline{\theta}_1(\tau) = \int_0^1 \theta_1(X,\tau)dX \quad \text{para a umidade,} \qquad (17)$$

$$\overline{\theta}_2(\tau) = \int_0^1 \theta_2(X,\tau)dX \quad \text{para a temperatura.} \qquad (18)$$

Ainda, nesta formulação, os potenciais na superfície são aproximados pelos seus valores médios no interior :

$$\theta_1(1,\tau) \cong \overline{\theta}_1(\tau) \quad . \qquad (19)$$

$$\theta_2(1,\tau) \cong \overline{\theta}_2(\tau) \quad . \qquad (20)$$

Utilizando as aproximações apresentadas nas eq. de (17) a (20) obtém-se a solução do sistema de equações definido pelas eq. (09) e (10), sujeito às condições iniciais (11) e (12) e condições de contorno de (13) a (16), para o caso (2):

$$\overline{\theta}_1 = 1 - \exp(-LuBi_m\tau) \qquad (21)$$

$$\overline{\theta}_2 = (1 - \exp(-Bi_q\tau) + \frac{KoLuBi_m}{Bi_q - LuBi_m}\left[1 - \exp\left(\left(Bi_q - LuBi_m\right)\tau\right)\right]\exp(-Bi_q\tau) \qquad (22)$$

As eq. (21) e (22) são utilizadas para estimar preliminarmente os parâmetros h_m e h_q. As Figuras 9 e 10 apresentam uma comparação entre os dados experimentais e o modelo ajustado.

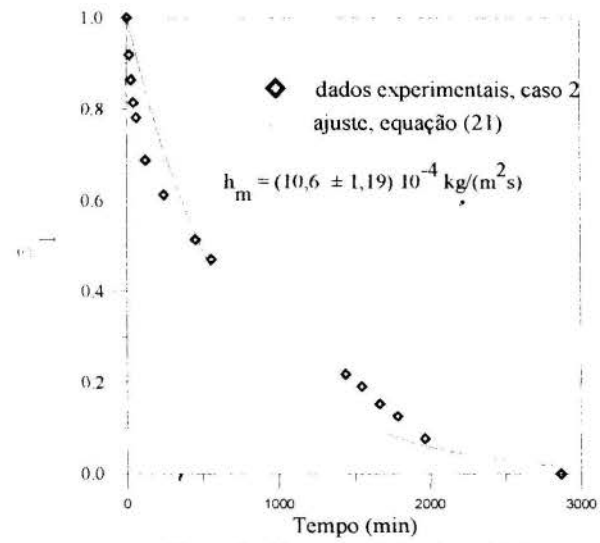


Figura 9 - Ajuste dos dados de umidade.

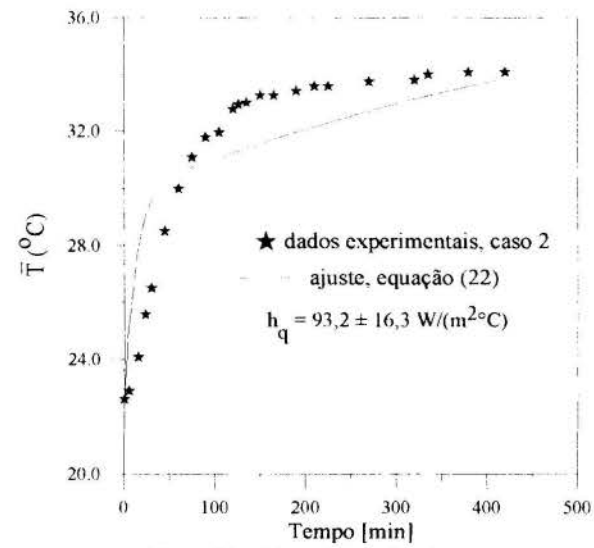


Figura 10 - Ajuste dos dados de temperatura.

CONCLUSÕES

Foi montado um sistema que possibilita o estudo da secagem de materiais capilares através do levantamento experimental dos perfis de temperatura e umidade que se estabelecem ao longo da amostra. Nos estudos preliminares de avaliação do sistema, foi utilizado uma amostra delgada e medidas apenas os valores médios de temperatura e umidade.

Em função dos vários períodos de taxa de secagem apresentados nas Figuras 4 e 7, pode-se concluir que existe mais de um mecanismo de transferência de massa para o meio estudado.

Ainda dentro do escopo da avaliação, foi possível estimar preliminarmente dois parâmetros da teoria de Luikov associados à transferência de calor e massa no processo de secagem.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Borges, C. P. e Massarani, G. 1987, "Caracterização de Membranas de Microfiltração por Permeametria", XV ENEMP, Uberlândia, MG.

Gubulin, J. C., 1977, "Escoamento Bifásico em Meios Porosos", Tese de M.Sc., PEQ/COPPE/UFRJ.

Guigon, S. M. S., 1995, "Aproximações Analíticas e Solução Exata das Equações de Luikov para Secagem em Meios Porosos Capilares", Tese de M.Sc., PEM/COPPE/UFRJ.

Jen Y. Liu 1991, "Solutions of Luikov Equations of Heat and Mass Transfer in Capillary-Porous Bodies", Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.ume 34, Número 7, pp. 1747-1754.

Jen Y. Liu 1991, "Drying of Porous Materials in a Medium With Variable Potentials", Transactions of the ASME, Journal of Heat Transfer, Volume 113, pp. 757-762..

Lewis R. W. e Ferguson W. J. 1990, "The Effect of Temperature and Total Gas Pressure on the Moisture Content in a Capillary Porous Body", International Journal for Numerical Methods in Engineering, Volume 29, pp. 357-369

Luikov, A. V., 1966, "Heat and Mass Transfer in Capillary-porous Bodies", Pergamon Press, Oxfor.

Massarani, G. 1989, "Aspectos da Fluidodinâmica em Meios Porosos", Publicação especial da Revista Brasileira de Engenharia.

Northfleet, I. M., 1980, "Estudo da Secagem com Raios Gama", Tese de M.Sc., PEQ/COPPE/UFRJ.

Pinto, J. C. e Lobão, M. W. e Monteiro, J. L., 1991, Estima: Um Pacote Computacional para Estimação de Parâmetros e Projeto de Experimentos. Manual de Utilização PEQ/COPPE/UFRJ.

Ribeiro, J. W., Cotta, R. M. e Mikhailov, M. D., 1993, "Integral Transform Solution of Luikov's Equations for Heat and Mass Transfer in Capillary Porous Media", Int. J. Heat and Mass Transfer.

SUMMARY

An equipment was constructed which enables the determination of the humidity and the temperature in cylindrical capillary-porous bodies. Experiments were carried out using the gravimetric technique to measure the average humidity. In future developments a gamma-rays technique will be used to measure humidity profile. capillary-porous bodies.

ESTUDO TEÓRICO DA CONVECÇÃO EM SECADORES SUBMETIDOS A ESCOAMENTO PULSANTE E PERMEANTE

Fraenkel, S.L.
Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Nogueira, L.A.H.
Instituto de Engenharia Mecânica
Escola Federal de Engenharia de Itajubá

Carvalho Jr., J.A.
Laboratório Associado de Combustão e Propulsão
Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo do efeito do escoamento pulsante, produzido em tubo de Rijke, sobre o processo de secagem. Admite-se que o efeito fundamental ocorra no período de secagem a taxa constante, devido ao incremento do coeficiente convectivo associado às oscilações na velocidade permeante no secador. No primeiro modelo analisado, faz-se uma analogia entre um secador com leito fixo sob escoamento pulsante e um secador com leito vibrado. Segundo outra analogia, admitida para os outros três modelos considerados, adotaram-se diferentes correlações para os coeficientes em secagem sob escoamento permanente, incorporando-se o efeito das pulsações mediante a integração numérica, em função da velocidade acústica, ao longo de um período de oscilação. Os casos estudados foram comparados com a situação na ausência de pulsações.

INTRODUÇÃO

A secagem dos produtos alimentícios os torna mais resistentes ao ataque de bactérias e ao desenvolvimento de fungos, microrganismos que sobrevivem nos alimentos graças à existência de partículas de água e são um dos principais fatores responsáveis para sua deterioração. Assim, a redução dos níveis de umidade aumenta a vida dos alimentos e permite uma maior oferta alimentar, devido à menor perda.

Neste trabalho são investigadas as características do processo de secagem realizado em um campo acústico, produzido em Tubo de Rijke, que apresenta o potencial de aumentar consideravelmente as taxas de desumidificação, especialmente durante o período de secagem conhecido como etapa a taxa constante.

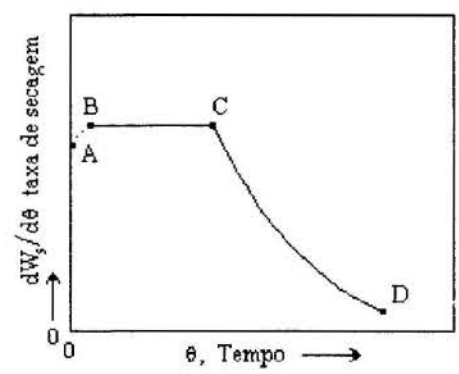


Figura 1 - Etapas na secagem de sólidos.

SECAGEM A TAXA CONSTANTE

No período de secagem a taxa constante, o mecanismo dominante na transferência de calor e massa entre o fluido de secagem e o material úmido é a convecção na superfície do sólido, que se encontra saturada e sem restrições de movimentação da umidade em seu interior. A secagem ocorre assim pela difusão do vapor a partir da superfície saturada do material e através de uma película de ar estagnado para o ambiente. O movimento da umidade dentro do sólido é suficientemente rápido para manter a condição de saturação na superfície, e a taxa da secagem é controlada pela taxa de transferência de calor para a superfície evaporante. A taxa de transferência de massa equilibra a taxa de transferência de calor, e a temperatura da superfície saturada permanece constante. Após esta etapa, passam a dominar os processos que determinam o aporte de umidade na superfície do material, surgindo então o período a taxa decrescente, pouco influenciada pelas condições do escoamento. A Figura 1 apresenta esquematicamente a evolução de um processo típico de secagem.

A Eq. (1) apresenta a relação energética fundamental para a taxa de secagem no período a velocidade constante, evidenciando o impacto direto do coeficiente convectivo.

$$\frac{dW_s}{d\theta} = \frac{h_t A \Delta t}{\lambda} = K_g A \Delta p \ , \qquad (1)$$

Nessa expressão, $dW_s/d\theta$ é a taxa de secagem, h_t corresponde ao coeficiente global de transmissão de calor (dominado pela convecção), A a área específica de transferência de calor, t a temperatura de bulbo seco do gás, e t_s a temperatura da superfície de evaporação. Quando o calor para a evaporação, durante o período a taxa constante, é fornecido por um gás quente, há um equilíbrio dinâmico entre a taxa de transferência de calor para o material e a taxa de remoção do vapor da superfície. Assim, vale a expressão da direita na Eq. (1), onde K_g o coeficiente de transferência de massa, A a área específica e $\Delta p = p_s - p$, sendo p_s a pressão de vapor de água na temperatura t_s da superfície e p a pressão parcial do vapor de água no gás .

EVOLUÇÃO DA COMBUSTÃO PULSANTE

Oscilações acústicas produzidas por calor foram provavelmente descobertas por Higgins em 1777 (Tyndall, 1970), quando ele produziu chamas sonoras de hidrogênio em tubos abertos. Mais tarde, em 1859, Rijke (Rayleigh, 1945) observou que oscilações eram geradas quando uma grelha metálica aquecida era

colocada na parte inferior de um tubo vertical aberto em ambas as extremidades. Posteriormente Rayleigh estabeleceu que a condição necessária para a amplificação de qualquer perturbação em um escoamento, com o consequente aparecimento de ondas acústicas, é estabelecida quando a taxa de calor transferida periodicamente ao escoamento estiver em fase com a perturbação de pressão, elevando a amplitude de pressão. O valor limite para essa amplitude ocorre quando a taxa de energia absorvida pela onda acústica se igualar à taxa de energia dissipada (por viscosidade, por exemplo).

Este fenômeno apresenta riscos quando ocorre em sistemas onde sua presença é indesejável, como nas câmaras de combustão de foguetes, mas pode auxiliar no aperfeiçoamento de sistemas térmicos. Uma aplicação da combustão pulsante foi introduzida por Severyanin (1982) na então União Soviética e desenvolvida por Zinn e colaboradores nos Estados Unidos (Zinn et al, 1982; Carvalho, 1983; Carvalho et al, 1984; Wang, 1985). Tal combustor recebeu a denominação de combustor tipo Rijke, por consistir de um tubo de Rijke cuja grelha metálica original foi substituída por um leito em combustão. A partir de 1985, novas versões do combustor tipo Rijke foram desenvolvidas no Brasil, nas quais foram testados, como combustível, álcool etílico (Couto, 1989), carvão vegetal (Ferreira e Carvalho, 1990), turfa peletizada (Ferreira et al, 1990) e casca de dendê (Torres et al, 1992). Assim pode-se considerar como já suficientemente conhecida a tecnologia de produção de fluxos de gases quentes com ondas acústicas.

Uma aplicação do processo na secagem de grãos foi investigada por Tamburello et al (1982), que verificaram que as oscilações acústicas aumentam o coeficiente de troca convectiva entre o gás aquecido e os grãos, incrementando a eficiência e a taxa de secagem e reduzindo os custos. Contudo este trabalho pouco avança na formulação de um modelo explicativo para este comportamento.

ONDAS ACÚSTICAS GERADAS TERMICAMENTE

As oscilações acústicas geradas termicamente podem ser obtidas em um combustor pulsante tubular tipo tubo de Rijke, cujo esquema simplificado é mostrado na Figura 2. Carvalho (1993) desenvolveu o equacionamento que relaciona a frequência e a amplitude de oscilação com a pressão e a velocidade acústicas e a temperatura média. Tais parâmetros são utilizados na modelagem do secador de leito fixo com escoamento permeante e pulsante.

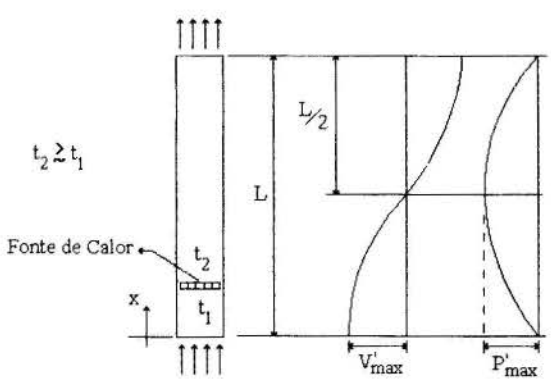


Figura 2 - Tubo de Rijke com a estrutura de onda acústica do modo fundamental.

Para o modo fundamental ou 1° harmônico, que é o caso mais comum de operação de um tubo de Rijke, as equações para amplitude de pressão e a velocidade acústicas são:

$$P'(x,\theta) = -P'_{max,L/2}\, \mathrm{sen}\frac{\pi}{L}x \cos\frac{\pi}{L}c\theta, \tag{2}$$

$$V'_a(x,\theta) = \frac{P'_{max,L/2}}{\bar{\rho}_a c}\cos\frac{\pi}{L}x\, \mathrm{sen}\frac{\pi}{L}c\theta\,. \tag{3}$$

A amplitude do deslocamento do gás na seção L, de interesse para o problema de secagem é obtida através de:

$$V'_a(L,\theta) = \underbrace{\frac{P'_{max,L/2}}{\bar{\rho}_a c}}_{\text{amplitude de velocidade em x = L (obtida da medida de } P'_{max,L/2})} \mathrm{sen}\frac{\pi}{L}c\theta. \tag{4}$$

a amplitude do deslocamento do gás na seção x = L

$$X'(L,\theta) = \underbrace{\frac{P'_{max,L/2}}{\bar{\rho}_a c^2}\frac{L}{\pi}}_{\text{amplitude de oscilação}} \cos\frac{\pi}{L}c\theta. \tag{5}$$

As condições de operação e a geometria do tubo de Rijke, para os casos analisados no presente trabalho, constam da Tabela 1.

Tabela 1 - Condições de operação e geometria consideradas

parâmetro	valor
temperatura média	343 K
massa específica do ar, ρ_a	1,03 kg / m^3
velocidade do som, c	371 m / s
viscosidade, μ_a	2,04 x 10^5 kg / m-s
nº de Prandtl	0,70
comprimento do tubo, L	3,20 m
frequência	58 Hz
amplitude de pressão, $P'_{max,L/2}$	1- 40 mbar

MODELOS PARA SECAGEM SOB ESCOAMENTO PULSANTE

Para o estudo da secagem sob escoamento pulsante, considerando o período a velocidade constante, admite-se que o efeito fundamental é devido à variação do coeficiente convectivo h', decorrente das variações da velocidade do ar permeante V_a. As demais condições são as mesmas usadas no escoamento uniforme. Assim, para a solução das equações sujeitas a esta hipótese trata-se de obter as relações adicionais para h' e V_a. Para esse coeficiente convectivo não foram encontrados na literatura consultada informações ou modelos que apresentem as relações desejadas em escoamentos pulsantes. Entretanto, existem alguns trabalhos teóricos e experimentais dedicados ao estudo da secagem em leitos vibrados, inclusive em gamas de frequência e amplitudes bastante próximas àquelas características dos escoamentos pulsantes, podendo ser considerada uma analogia entre leitos vibrados e escoamentos pulsados. Outra abordagem é baseada em modelos teóricos de transferência de calor em torno de sólidos, inserindo-se o efeito das pulsações através da integração dsa velocidade acústica para um período de oscilação.

Analogia com leitos vibrados. Uma abrangente revisão dos

secadores com leito vibrado foi apresentada por Gupta e Mujumdar (1980), que fornece os modelos para h'_v (coeficiente de transferência de calor em leito vibrado), onde se destaca o trabalho de Zaitsev et al. (1976), que propôs a expressão:

$$h'_v = h'[1,1(\alpha\omega / \overline{V}_a)^{0,4}] \qquad (6)$$

Tal expressão é válida para as condições da Tabela 2.

Tabela 2 - Condições utilizadas para levantamento da Eq.(6)

α ($\times 10^3$) amplitude na faixa	1 - 14 [m]
ω frequência na faixa	10 - 70 [s^{-1}]
altura do leito	0,10 [m]
$\overline{V}_a$ fluxo de ar, médio, na faixa	0 - 0,6 [$m\ s^{-1}$]
tamanho da partícula ($\times 10^6$)	620 [m]

A expressão (6) não foi desenvolvida explicitamente para grãos de cereais, mas para a cafeína. A mesma é considerada ainda válida para efeito do presente estudo, já que o coeficiente de transporte h' resulta fundamentalmente de um processo na fase gasosa externa ao meio em secagem. Observa-se que os materiais biológicos podem apresentar coeficientes de convecção diferentes dos obtidos para sólidos porosos inertes.

Modelos de transferência de calor para escoamento em torno de sólidos. Recentemente Calado (1993) apresentou uma revisão sobre os coeficientes de transferência de calor, tendo sido identificados três modelos passíveis de serem analisados utilizando o escomento pulsante. (Ranz e Marshall, 1952, Bakker-Arkema et al., 1974, Gupta e Srinivason, 1982).

Ranz e Marshall (1952) propuseram a Eq. (7) desenvolvida para transferência de calor entre uma esfera e um gás em escoamento e foi aplicada na simulação de secadores de trigo em camada fina e em leitos fixo e fluidizado

$$\frac{h'd_p}{K_g} = 2 + 0.6\,Re^{0,5}\,Pr^{0,33} \qquad (7)$$

Bakker-Arkema et al. (1974) propuseram as expressões (8) e (9) considerando um diâmetro equivalente para o grão

$$h' = 0,263G_a^{0,59} \quad G_a \le 500 kg/m^2s \qquad (8)$$

$$h' = 0,69G_a^{0,49} \quad G_a > 500 kg/m^2s \qquad (9)$$

onde G_a [lb/ft^2h] e h' [$BTU/ft^2h°F$]

Gupta e Srinivason (1982) propuseram a expressão (10), desenvolvida para transferência de calor entre gás e partículas esféricas em leito fixo

$$\frac{h'd_p}{K_g} = 1,62\,Re^{0,25}\,Pr^{0,33} \qquad (10)$$

COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM SECAGEM COM ESCOAMENTO PULSANTE

Análise Utilizando a Formulação de Zaitsev. Admitindo-se que o efeito causado pelo escoamento pulsante através de um leito fixo colocado no topo de um tubo de Rijke é similar ao efeito da vibração do leito em ar estacionário, os termos de amplitude e frequência de oscilação da Eq. (6), α e ω, respectivamente, correspondem então aos parâmetros do escoamento oscilatório, já determinados. Assim, introduzindo as condições adotadas de operação, da geometria do tubo de Rijke e adimensionalisando a expressão, tem-se:

$$\frac{h'_p}{h'} = 1,1\left[\left(\frac{P'_{max,L/2}}{381,966 \times \overline{V}_a}\right)^2\right]^{1/5} \qquad (11)$$

Fazendo variar $P'_{max,\,L/2}$ e $\overline{V}_a$, construiu-se o gráfico da Figura 3, que mostra a razão entre os coeficientes convectivos em função da amplitude de pressão acústica na seção média do tubo de Rijke.

Observando a Figura 3, pode-se constatar que o sistema pulsante poderá apresentar ganhos na sua utilização sobre o sistema uniforme quando h'_p/h' for maior que a unidade, o que ocorre, para o intervalo de velocidades médias de escoamento de 0,5 a 3,0 m/s, se a amplitude de pressão acústica for maior que 1000 Pa.

É natural que a razão h'_p/h' aumente com a velocidade média para uma mesma amplitude de pressão acústica pela própria forma da Eq. (11), na qual a velocidade média aparece no denominador. Nos casos de velocidade média baixa, o coeficiente de troca térmica também será baixo, em termos absolutos. Assim, o ganho percentual poderá ser considerável, usando o processo pulsante.

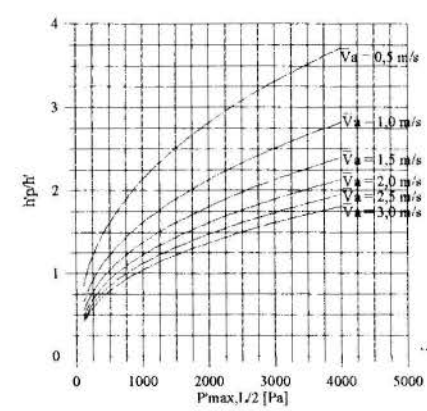


Figura 3 - Razão entre os coeficientes convectivos de transferência de calor no escoamento pulsante e uniforme para a formulação de Zaitsev et al (1976).

Análise Utilizando a Formulação de Ranz e Marshall. Substituindo os valores de operação, da geometria, adimensionalisando e integrando no ciclo, obtem-se a razão entre os coeficientes de transferência de calor com escoamento pulsante e uniforme, baseado nesta formulação:

$$\frac{h'_p}{h'} = \frac{1}{a_1 + a_2\left(\overline{V}_a d_p\right)^{0,5}} \int_0^{0,01723} \left\{ a_3 + a_4\left(d_p\right)^{0,5}\left[\left|\overline{V}_a + \frac{P'_{max,L/2}}{381,966}\,\mathrm{sen}\left(a_5 \times \theta\right)\right|\right]^{0,5}\right\} d\theta \,. \qquad (12)$$

onde $a_1 = 15{,}579$; $a_2 \doteq 0{,}0093$; $a_3 = 904{,}288$; $a_4 = 0{,}5398$; $a_5 = 364{,}71$

A integral da Eq. (12) foi resolvida numericamente usando o programa Mathematica (Wolfram, 1993). Tomando para o diâmetro da partícula, d_p, os valores 2, 4, 6, 8 e 10 mm e fazendo variar a velocidade média do escoamento, $\overline{V}_a$ e $P'_{max,L/2}$ obtiveram-se valores muito próximos da unidade para a razão entre os coeficientes convectivos de transferência de calor em função da amplitude de pressão acústica, para diâmetros de partícula considerados. Observou-se portanto que o sistema pulsante não apresentou, segundo este modelo, ganhos na sua utilização sobre o sistema uniforme, pois a razão h'p/h' é muito próxima da unidade, na medida em que esta formulação mostrou-se pouco sensível ao efeito do escoamento pulsante.

Análise Utilizando a Formulação de Bakker-Arkema. Analogamente, substituindo os valores de operação, da geometria, adimensionalisando e integrando no ciclo, obtem-se a razão entre os coeficientes de transferência de calor com escoamento pulsante e uniforme, baseado nesta formulação Assim, tem-se:

$$\frac{h'_p}{h'} = a_1 \int_0^{0{,}01723} \left[\left| 1 + a_2 \frac{P'_{max,L/2}}{\overline{V}_a} \operatorname{sen}(a_3 \times \theta) \right| \right]^{0{,}59} d\theta \quad . \quad (13)$$

onde $a_1 = 58{,}0453$; $a_2 = 0{,}00262$; $a_3 = 364{,}71$

Resolvendo de forma análoga e aplicando os mesmos valores para os parâmetros de operação, obteve-se o gráfico da Figura 4:

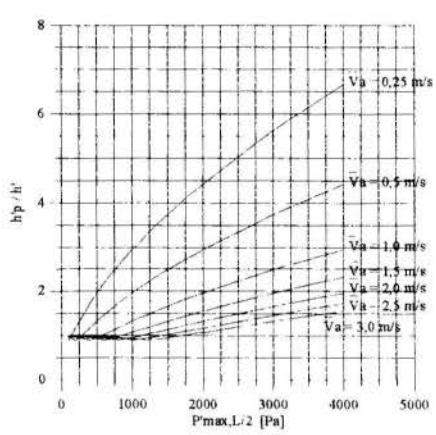


Figura 4 - Razão entre os coeficientes convectivos de transferência de calor no escoamento pulsante e uniforme para a formulação de Bakker-Arkema et al.(1974).

Análise Utilizando a Formulação de Gupta e Srinivason. Substituindo os valores de operação, da geometria, adimensionalisando e integrando no ciclo, obtem-se:

$$\frac{h'_p}{h'} = a_1 \int_0^{0{,}01723} \left[\left| 1 + a_2 \frac{P'_{max,L/2}}{\overline{V}_a} \operatorname{sen}(a_3 \times \theta) \right| \right]^{0{,}25} d\theta \quad (14)$$

onde $a_1 = 58{,}0453$; $a_2 = 0{,}00262$; $a_3 = 364{,}71$

A integral da Eq. (14) também foi resolvida numericamente através do programa Mathematica (Wolfram, 1993), permitindo obter os valores apresentados na Figura 5.

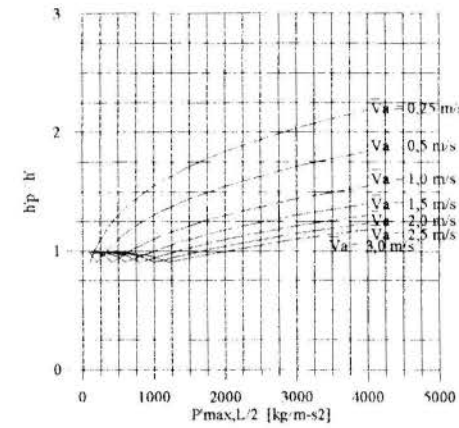


Figura 5 - Razão entre os coeficientes convectivos de transferência de calor no escoamento pulsante e uniforme para a formulação de Gupta e Srinivason (1982).

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

O comportamento da razão entre os coeficientes de convecção para escoamentos pulsante e não pulsante, respectivemante, segundo a formulação proposta por Zaitsev et al. (1976), Eq. (11), é mostrado no gráfico da Figura 3. Vê-se claramente um crescimento da razão h'_p/h' a medida que ocorre um aumento da amplitude de pressão acústica. Como o escoamento pulsante só se apresenta mais eficaz que o escoamento uniforme quando $h'_p/h'>1$, a faixa de operação do tubo de Rijke para a qual se obtém este resultado foge a faixa uitlizada por Zaitsev et al., frequência de 10 a 20 Hz, velocidade de escoamento da ordem de 0,2 m/s e amplitudes de oscilação de 2 a 8 mm. No tubo de Rijke a frequência é da ordem de 60 Hz, as velocidades médias de escoamento variam de 0,5 a 3,0 m/s e as amplitudes de oscilação de 0,7 mm para uma amplitude de pressão acústica de 100,1 Pa a 28,7 mm para uma da amplitude de pressão acústica de 4002,2 Pa. Se fosse possível considerar apenas as amplitudes de oscilação obteríamos 2 mm de amplitude de oscilação com uma amplitude de pressão acústica da ordem de 278,6 Pa. Observa-se na Figura 3 que para este caso $h'_p/h'>1$ quando as velocidades médias de escoamento estiverem abaixo de 1,0 m/s. Para amplitude de oscilação de 8 mm com uma amplitude de pressão acústica da ordem de 1114,4 Pa, $h'_p/h'>1$ quando as velocidades médias de escoamento estiverem abaixo de 3,0 m/s. Portanto o fator determinante da exclusão desta formulação é a frequência que foi utilizada por Zaitsev et al., muito baixa para uso no modelo de tubo de Rijke utilizado.

Verifica-se utilizando a Eq. (2), ou as condições de operação do tubo de Rijke, que para uma frequência de 10 Hz seria necessário um tubo de Rijke com um comprimento, L, de aproximadamente 18,6 m e para 20 Hz um comprimento de aproximadamente 9,3 m. Nestes dois casos adiciona-se um fator de complicação que é a manutenção da temperatura de 343 K (70 ^{0}C), admitida como condição de operação, em um tubo muito longo.

Na análise da formulação de Ranz e Marshall (1952), perturbou-se a mesma com os parâmetros do escoamento pulsante realizando-se a integração numérica no ciclo, com o resultado sendo comparado com o valor médio, Eq. (12). Os resultados apresentaram valores próximos da unidade. Observa-se que esta

formulação apresentou pouca sensibilidade ao escoamento pulsante, estando a razão adimensional, h'_p/h', muito próxima da unidade, podendo mesmo concluir-se que a razão é igual a unidade. Por esta razão esta formulação também revelou-se de pouca utilidade para a solução pretendida.

Fez-se a mesma análise, utilizada para a formulação de Ranz e Marshall, para as formulações de Bakker-Arkema et al. (1974) e Gupta e Srinivason (1982). As Figura 6 e 7 mostram as curvas obtidas através desta análise para as duas formulações. Verifica-se que para a mesmas condições de trabalho, para $h'_p/h'>1$, temos $(h'_p/h')_{Bakker\text{-}Arkema} > (h'_p/h')_{Gupta\ e\ Srinivason}$. Conclui-se portanto que a formulação prosposta por Bakker-Arkema et al. mostrou maior incremento do coeficiente convectivo quando sob escoamento pulsante que a formulação de Gupta e Srinivason. Este fato é confirmado pelas Figuras 6 e 7.

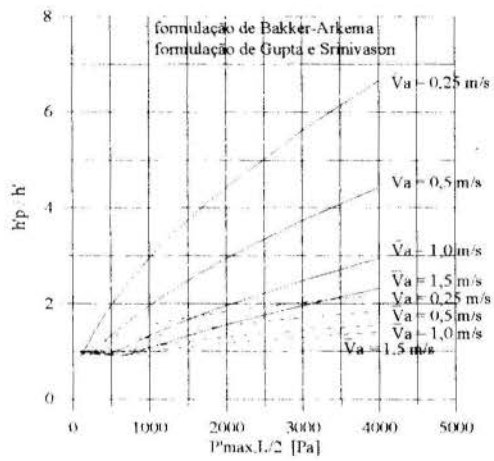


Figura 6 - Razão entre os coeficientes convectivos de transferência de calor no escoamento pulsante e uniforme em função da amplitude de pressão acústica na seção média do tubo de Rijke para as formulações de Bakker-Arkema e Gupta e Srinivason.

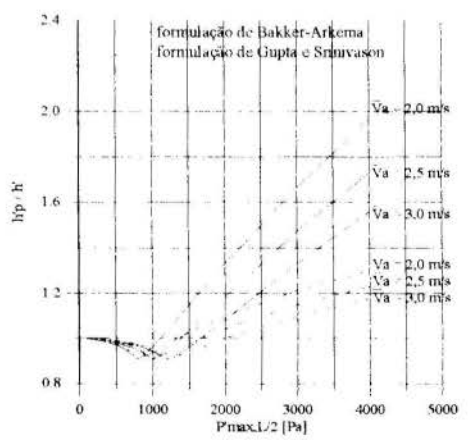


Figura 7 - Razão entre os coeficientes convectivos de transferência de calor no escoamento pulsante e uniforme em função da amplitude de pressão acústica na seção média do tubo de Rijke para as formulações de Bakker-Arkema e Gupta e Srinivason.

CONCLUSÕES

No presente trabalho investigou-se a razão adimensional entre os coeficientes convectivos de transferência de calor para escoamento pulsante, utilizando-se diferentes formulações. Um tubo de Rijke com fonte de calor, com caracteríticas conhecidas, adaptado à secagem serviu de modelo para o estabelecimento dos parâmetros acústicos. É oportuno concluir determinando o efeito do escomento pulsante sobre o tempo de secagem. Pode-se mostrar que, no período de secagem a taxa constante, vale a relação a seguir;

$$\left(\frac{dW_s}{d\theta}\right)_{puls.} = \frac{h'_p}{h'}\left(\frac{dW_s}{d\theta}\right)_{unif} \qquad (15)$$

Quando a razão $h'_p / h'>1$, o tempo de secagem no escoamento pulsante sera menor, como mostra a Figura 8, onde A-B-C-D representa o escoamento uniforme e A-B'-C'-D' o escoamento pulsante, sendo os trechos CD e C'D' paralelos por hipótese. Observe-se que os pontos C e C' devem apresentar a mesma umidade, correspondente a umidade crítica e início do período de secagem a taxa decrescente.

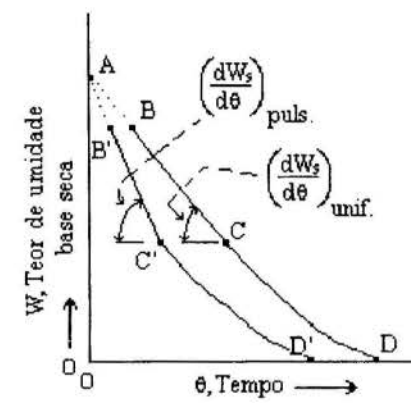


Figura 8 - Umidade base seca versus tempo. Escoamento uniforme e escoamento pulsante

Assim, a magnitude do efeito do escoamento pulsante sobre a redução do tempo de secagem irá depender fundamentalmente da umidade inicial do material em secagem. Nas condições em que este material se encontre mais úmido e portanto o período a taxa constante seja relativamente importante, a secagem sob escoamento pulsante irá apresentar desempenho melhor que a secagem convencional. Por outro lado, as situações onde o material a ser seco já se encontre com umidade inferior à umidade crítica, o efeito do escoamento pulsante não será relevante, já que os mecanismos dominantes para a transferência de calor e massa serão a condução térmica e a difusão ou capilaridade no interior da partícula em secagem.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Calado, V.M.A. "Modelagem e simulação de secadores em leito fixo e deslizante". (Tese de Doutorado em Ciências em Engenharia Química) - COPPE / UFRJ, maio 1993. 176p.

Carvalho Jr., J.A. "Investigation of the characteristics of a coal burning Rijke type pulsating combustor". (Tese de Doutorado) - Georgia Institute of Technology, 1983.

Carvalho Jr., J.A.; Wang, M.R.; Miller, N.; Daniel, B.R.; Zinn, B.T. "Controlling mechanisms and performance of coal burning Rijke type pulsating combustors". In: Proceedings of the

Symposium International on Combustion, 20., 1984. p.2011-2017.

Couto, H.S. "Queima de combustíveis líquidos em combustores pulsantes". (Tese de Doutorado em Ciências em Engenharia Química) - COPPE / UFRJ, 1989. 132p.

Ferreira, M.A.; Carvalho Jr., J.A. "Performance characteristics of an experimental Rijke type pulsating combustor". Fuel, 19 (6): 684-689, 1990.

Ferreira, M.A.; Bressan, C.; Victório, J.R.S.; Carvalho Jr., J.A.; Heiskanen,V.P. "Burning of finnish peat pellets in a Brazilian experimental pulsating combustor". In: Encontro Nacional de Ciências Térmicas, 3., Itapema, 9-12 dez. 1990. Anais. Itapema, Universidade Federal de Santa Catarina, 1990. p.761-766.

Fraenkel, S.L. Estudo teórico da secagem em leito fixo com escoamento pulsante. Dissertação de Mestrado - Escola Federal de Engenharia de Itajubá, 1995. 96p.

Gupta, R.; Leung, P.; Mujumdar, A.S. "Drying of granular materials in a vibrated fluidized bed". In: Mujumdar, A.S., ed. Drying'80: Proceedings of the second international symposium. Washington, D.C., Hemisphere Publishing, 1980. v.2, p.201-207.

Gupta, R.; Mujumdar, A.S. "Aerodynamic and thermal characteristics of vibrated fluid beds: a review". In: Mujumdar, A.S., ed. Drying'80: developments in drying. Washington, D.C., Hemisphere Publishing, 1980. v.1, p.141-150.

Rayleigh, Lord. "The theory of sound". New York, NY, Dover, 1945. v.2, cap. 16, p.224 - 235.

Severyanin, V.S. "Application of Pulsating Combustion in Industrial Installations". Proceedings of the Symposium on Pulse Combustion Applications. 1982, p7.17.23.(GRI - 82/0009.2).

Tamburello, N.M.; Hill, G.A.; Goldman, Y.; Seginer, A.; Salomon, M.; Timat, Y. "The development of a vegetable and fruit dehydration unit with a pulse-combustion chamber". Proceedings of the Symposium on Pulse-Combustion Application. 1982. p13.1-13.7. (GRI-82/0009.2).

Torres, E.A.; Victório, J.R.S.; Ferreira, M.A.; Carvalho Jr., J.A. "Pulsating combustion of a palm oil fruit bark". FUEL, 71(3):257-261,1992.

Tyndall, J. "On sounding and sensitive flames". Physical Sciences, The Royal Institution. Library of Science, 2:30-37,1970.

Wang, M.R. "Mechanisms and performance of a coal burning Rijke type pulsating combustor". (Tese de Doutorado) - Georgia Institute of Technology, 1985.

Wolfram, S. "Mathematica: a system for doing mathematics by computer". 2.ed. Reading, MA, Addison-Wesley, 1991. 961p.

Zinn, B.T. ; Carvalho Jr., J.A.; Miller, N. and Daniel, B.R. "Development of a Pulsating Combustor for Burning of Wood", Proceedings of the Symposium on Pulse-Combustion Applications. 1982, p11.1 - 11.11. (GRI-82/0009.2).

Zaitsev,E.D.; Redekop, V.I.; Shvetsov, V.V. "Hydrodynamics and external heat exchange of a vibrated fluidized layer of pharmaceutical preparations". Pharmaceutical Chemistry Journal, 10:354-358,1976.

LAMINAR FORCED HEAT AND MASS TRANSFER AROUND A CYLINDER UNDER DRYING CONDITIONS

Fortes, M., Ferreira, W.F. and Barreto A.A.
Departamento de Engenharia Mecânica - UFMG
Av. Antônio Carlos, 6627
31.270 - 901 - Belo Horizonte - MG - Brazil

SUMMARY

This paper presents the full development of a segregated finite element methodology for solving convection-diffusion problems; the original method has been modified through the addition of a streamline upwind technique, so that false diffusion numerical errors could be decreased. The methodology was applied to solve the problem of simultaneous heat, mass and momentum transfer around a horizontally placed infinite cylinder under laminar forced convection conditions. The simulated data agreed with the available experimental data within the associated experimental errors.

INTRODUCTION

Drying is a unit operation present in several biological and industrial processes such as drying of agricultural products, food dehydration, wood thermal treatment, drying of ceramics and brick, and also in the study of moisture migration in porous media (Brooker, Bakker-Arkema and Hall, 1974; Keey, 1972; Fortes and Okos, 1980).

The analysis of drying involves heat and mass transfer conjugated processes, both in the solid and in the fluid. Sophisticated models for drying have been formulated either by means of classical (mechanistic) theories (Phillip and De Vries, 1957), or non-equilibrium thermodynamic (Luikov,1966). Flux equations based on both irreversible thermodynamics and mechanistic theories can also be applied to grain drying (Fortes and Okos, 1981).

A complete modeling of drying problems by means of any theory involves a set of non-linear diffusion equations as applied to the drying medium, coupled to the respective boundary layer equations. Numerical (finite difference, FDM, finite volume, FVM, and finite element methods, FEM) and analytical methods have been used for discretizing and, thus, solving convective-diffusive partial differential equations. This paper is concerned with FEM as applied to solving drying-related boundary layer problems; the choice of this method is related to the simplicity of its application when complex geometries are to be considered. The FEM, using Galerkin's formulation, has been used to solve Navier-Stokes' equations. However, Galerkin's method requires the use of direct solvers of the resulting discretized equations, the use of distinct interpolation functions for velocities and pressure and it usually leads to numerical errors due to false diffusion and numerical dispersion (Taylor and Hughes, 1981; Brooks and Hughes, 1982).

A comprehensive review of Petrov-Galerkin and Taylor-Galerkin FEM is found in Zienkiewicz and Taylor (1991) and, thus, from the vast literature, only those works directly related to the present paper will be considered here. Hughes (1978) presented a streamline upwind methodology for solving convective-diffusive equations. The method, which led to exact one dimensional solutions, consisted in applying Galerkin's method to the diffusive terms and a special integration method to the advective terms. Brooks and Hughes (1982) developed a finite element formulation for convection-dominated flows utilizing a Petrov-Galerkin formulation and extending Hughes' (1978) methodology, so as to decrease false diffusion effects. Schnipke and Rice (1985a-b) presented a finite element method which makes use of upwind values to predict streamlined downwind advection terms; the method employs the same interpolation function for velocities and pressure and allows the use of a segregated method such as the SIMPLE method (Patankar, 1980). However, Schnipke and Rice's (1985a-b) method is accurate only for convection-dominated flows (Gurgel and Fortes, 1994). On the other hand, Shaw (1991) also followed a strategy similar to the FVM (Patankar, 1980), and developed a Poisson type equation for the continuity (pressure) equation, which did not lead to spurious pressure modes. In this way, Shaw's method (1991) also allows using interpolation functions of the same order for velocities and pressure and iterative methods of solution of the discretized equations. However Shaw's (1991) method is limited to problems where Reynolds numbers are smaller than 5. An application of Shaw's method to evaluate transport coefficients under **natural** convection is found in Crêspo et al. (1995). To overcome the limitation of his method, Shaw (1991) suggested the use of upwind schemes.

The specific objectives of this work were:

1. to evaluate the predictive ability of the method proposed by Shaw (1991) to solve heat, mass and momentum simultaneous transfer problems in laminar forced convection, for eventual application to drying problems;
2. to obtain, via FEM, heat and mass transfer coefficients, for forced convection across horizontal cylinders, in the Reynolds numbers range between 20 and 100;
3. to analyze the effect of temperature and concentration dependent properties over heat and mass transfer coefficients; and
4. to compare numerical results with available experimental data.

METHODOLOGY

The continuity and momentum equations for two-dimensional, steady and incompressible flow are

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}=0 \qquad (1)$$

$$\rho u\frac{\partial u}{\partial x}+\rho v\frac{\partial u}{\partial y}=-\frac{\partial p}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) \qquad (2)$$

$$\rho u\frac{\partial v}{\partial x}+\rho v\frac{\partial v}{\partial y}=-\frac{\partial p}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) \quad (3)$$

where u and v are the velocity components in the x and y directions, respectively; p is the pressure component, ρ, the fluid density and μ, the fluid dynamic viscosity. The formulation to be presented is based upon Shaw's (1991) methodology.

By applying Galerkin's formulation to Eq. (2), that is, by multiplying Eq. (2) by the shape function and integrating over all the domain, the momentum-x equation becomes:

$$\int_\Omega N_i\left[\rho u\frac{\partial u}{\partial x}+\rho v\frac{\partial u}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right]d\Omega= \quad (4)$$

$$=\int_\Omega -N_i\frac{\partial p}{\partial x}d\Omega$$

where Ω is the domain and N_i is the shape function.

Integrating Eq. (4) by parts, utilizing Gauss' theorem and substituting the velocity derivative components by the interpolation expressions, allows Eq. (2) to be written as:

$$\int_\Omega\left(\rho u N_i\frac{\partial N_j}{\partial x}+\rho v N_i\frac{\partial N_j}{\partial y}+\mu\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+\mu\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}\right)u_j d\Omega=$$

$$\int_\Omega -N_i\frac{\partial p}{\partial x}d\Omega+\int_\Gamma N_i\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}n_x+\mu\frac{\partial u}{\partial y}n_y\right)d\Gamma \quad (5)$$

A similar procedure can be applied to Eq. 3, leading to:

$$\int_\Omega\left(\rho u N_i\frac{\partial N_j}{\partial x}+\rho v N_i\frac{\partial N_j}{\partial y}+\mu\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+\mu\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}\right)v_j d\Omega=$$

$$\int_\Omega -N_i\frac{\partial p}{\partial y}d\Omega+\int_\Gamma N_i\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}n_x+\mu\frac{\partial v}{\partial y}n_y\right)d\Gamma \quad (6)$$

In these equations, Γ is the boundary and n_x and n_y, the outward normal unit vectors to each element boundary.

The boundary terms in Eqs. (5-6) can be neglected because either the velocities (u and v) are prescribed at the boundaries or the mass flux is zero (continuity must be preserved).

Thus, Eqs. (5-6) can be written in the condensed forms:

$$Au_j = Bp_{ij}\ ; \qquad Av_j = Cp_{ij} \quad (7)$$

where matrix A is a function of velocities and local transport and thermodynamic properties.

The exact values of u, v and p can be expressed as: $u = u^* + u'$; $v = v^* + v'$ and $p = p^* + p'$, where the starred values (*) are approximate values obtained from the solution of the momentum discretized equations, and the primed values (') are the corrections utilized to enforce continuity. Thus, by considering only the u components, one can write: $A(u^*_j + u'_j) = B(p^*_j + p'_j)$. Since the starred values satisfy the momentum equations, $Au^*_j = Bp^*_j$ and $Au'_j = Bp'_j$, the nodal values of u' and v' can be written as:

$$u'_j = A^{-1}B\,p'_j, \quad \text{and} \quad v'_j = A^{-1}C\,p'_j \quad (8)$$

Matrix A can be written as the sum of a matrix D (with diagonal terms only), and a matrix F (with the non-diagonal terms). Shaw (1991) presumed that Eqs. (8) can be simplified, ignoring matrix F, and so:

$$u'_j = D^{-1}B\,p'_j, \quad \text{and} \quad v'_j = D^{-1}C\,p'_j \quad (9)$$

This simplification is based on fact that the pressure correction term vanishes when the numerical approximation converges to the solution. The vectors of the velocity corrections, u_i' and v_i', can be obtained as function of p_i' by integrating Eqs. (9) in all domain, by means of the expressions:

$$\int_\Omega N_i N_j u'_j d\Omega = \int_\Omega N_i N_j D^{-1}Bp'_j d\Omega \quad (10)$$

$$\int_\Omega N_i N_j v'_j d\Omega = \int_\Omega N_i N_j D^{-1}Cp'_j d\Omega \quad (11)$$

The utilization of a lumped matrix allows the matrix in the left hand side of Eqs. (8-9) to be easily inverted and, thus, to obtain u_i' and v_i' in a more efficient way. Discretization of the continuity equation was obtained by employing Galerkin's formulation:

$$\int_\Omega N_i\left(\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial v}{\partial y}\right)d\Omega = 0 \quad (12)$$

Substituting the expression for u and v as functions of u*, u', v* and v', as shown before, in Eq. (12), one obtains:

$$\int_\Omega N_i\left(\frac{\partial u'}{\partial x}+\frac{\partial v'}{\partial y}\right)d\Omega = -\int_\Omega N_i\left(\frac{\partial u^*}{\partial x}+\frac{\partial v^*}{\partial y}\right)d\Omega \quad (13)$$

Integrating both sides of Eq. (11) by parts one arrives at:

$$-\int_\Omega\frac{\partial N_i}{\partial x}N_j u'_j d\Omega-\int_\Omega\frac{\partial N_i}{\partial y}N_j v'_j d\Omega+$$

$$+\int_\Gamma N_i(u'n_x+v'n_y)d\Gamma=-\int_\Omega N_i\left(\frac{\partial u^*}{\partial x}+\frac{\partial v^*}{\partial y}\right)d\Omega \quad (14)$$

The third term on the left hand side of Eq. (14) can be neglected because, in most of the problems, velocities are specified at the boundaries and the velocity corrections vanish there. Substituting Eq. (9) in Eq. (14), one has:

$$-\int\frac{\partial N_i}{\partial x}N_j D^{-1}Bd\Omega p_j-\int\frac{\partial N_i}{\partial y}N_j D^{-1}Bd\Omega p_j=$$

$$=-\int_\Omega N_i\left(\frac{\partial u'}{\partial x}+\frac{\partial v^*}{\partial y}\right)d\Omega \quad (15)$$

This last equation is the pressure correction equation, and it can be written as:

$$(B^T D^{-1}B+C^T D^{-1}C)\,p_j=\delta^* \quad (16)$$

where δ^* represents the right hand side of Eq. (15).

Hughes' Method (1978). This method was used to solve the problem of simultaneous energy, mass and momentum transfer, to be discussed shortly. The methodology can be found in the cited work and will not be discussed here, for brevity. As pointed out by Hughes (1978), his method allows controlling the upwind degree, and thus obtaining more accurate solutions, and it also leads to a computationally efficient scheme. Results were also obtained by means of Brooks and Hughes' (1982) Streamline Upwind Petrov-Galerkin (SUPG) method and agreed essentially with Hughes' (1978) method, which is simpler.

Modeling Forced Convection Processes around a Cylinder. In this work, the problem of fluid flow across a horizontal infinite cylinder was studied. The problem can be stated as the forced flow at Reynolds

numbers up to 100 and simultaneous heat, mass and momentum transfer. The cylinder was assumed to be in contact with the ambient air; the air temperature and concentration (T_∞ and C_∞) far from the boundary were fixed, as illustrated in Figure 1.

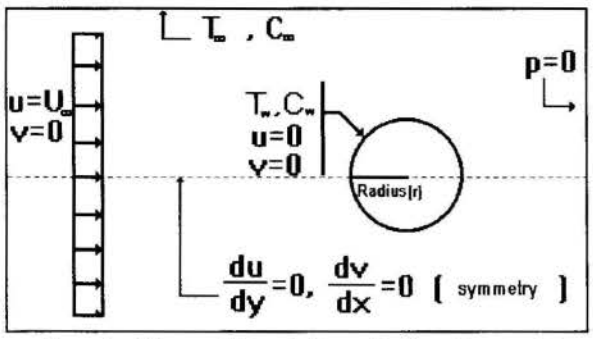


Figure 1 - Scheme of the cylinder and its boundary conditions.

Mass, momentum, energy and species conservation equations for this problem are:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} = 0 \qquad (17)$$

$$\rho\left(u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) \qquad (18)$$

$$\rho\left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y}\right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) \qquad (19)$$

$$\rho C_p\left(u\frac{\partial T}{\partial x} + v\frac{\partial T}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(k_T\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_T\frac{\partial T}{\partial y}\right) \qquad (20)$$

$$\rho\left(u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C}{\partial y}\right) \qquad (21)$$

The boundary conditions were:

- at $x=0$ $u=U_\infty$, $v=0$, $T=T_\infty$, $C=C_\infty$
- at $x=x_{max}$ $\partial u/\partial x=0$, $\partial v/\partial x=0$, $\partial T/\partial x=0$, $\partial C/\partial x=0$,
- at $y=0$ $\partial u/\partial y=0$, $\partial v/\partial y=0$, $\partial T/\partial y=0$, $\partial C/\partial y=0$,
- at $y=y_{max}$ $u=U_\infty$, $v=0$, $T=T_\infty$, $C=C_\infty$, $p=0$;
- at the solid wall $u=0$ $v=0$, $T=T_w$ $C=C_w$.

Modified Version of Shaw's Method. In the above set of partial differential equations transport and thermodynamic properties are temperature dependent (and, eventually, in the case of drying studies, are also moisture dependent). On the other hand, Shaw's method was developed aiming at solving the incompressible and constant-property Navier-Stokes equations. Thus the following set of modifications had to be incorporated to the original Shaw's method:

1. First, Galerkin's formulation was applied to the momentum Eqs. (18) and (19) led to equations with the exact same appearance as Eqs. (5) and (6). Similarly, the aspect of equations (7) to (11) was kept the same. However, in these equations, the associated values of ρ and μ had to be written in terms of temperature and calculated at the corresponding Gauss points.
2. Since the incompressibility assumption is retained (low Reynolds number), Eq. (17) was rewritten in the form:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = -\left[\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial y}\right] \qquad (22)$$

By following the same steps which led to Eq. (16), one arrives again at a equation with the same aspect as Eq. (16), but noting now that:

$$\delta^* = -\int_\Omega N_i\left[\left(\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v^*}{\partial y}\right) + \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial y}\right)\right]d\Omega \qquad (23)$$

3. Galerkin's formulation applied to the **energy** and **species** equations lead, respectively, to:

$$\int_\Omega\left(\rho c_p u N_i\frac{\partial N_j}{\partial x} + \rho c_p v N_i\frac{\partial N_j}{\partial y} + \mu\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \mu\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}\right)T_j\,d\Omega = \int_\Gamma N_i\left(k_T\frac{\partial T}{\partial x}n_x + k_T\frac{\partial T}{\partial y}n_y\right)d\Gamma \qquad (24)$$

$$\int_\Omega\left(\rho u N_i\frac{\partial N_j}{\partial x} + \rho v N_i\frac{\partial N_j}{\partial y} + D\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + D\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}\right)C_j\,d\Omega = \int_\Gamma N_i\left(D\frac{\partial C}{\partial x}n_x + D\frac{\partial C}{\partial y}n_y\right)d\Gamma \qquad (25)$$

In Eqs. (23) to (25), ρ, c_p, D and k_T should be expressed in terms of T and evaluated at the associated Gauss points.

4. Solutions were obtained by first solving the associated constant property Navier-Stokes equations; after convergence was achieved, the energy and concentration equations were solved. Temperature and concentration profiles were then corrected and the variable property Navier-Stokes equations were again solved. An iterated procedure led to the numerical solutions. As mentioned before, this problem was solved by making use of Hughes' (1978) formulation.

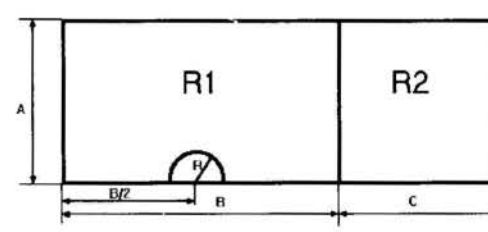


Figure 2. Subdivision of the region around the cylinder

Finite Element Subdivision. The region of interest was divided into two subregions, as shown in Fig. 2. The first and finer subdivided subregion, R1, could be characterized as having:

- dimensions (cm): $0 < x < 10$ and $0 < y < 5$;
- number of elements : 560;
- discretized by lines approximately perpendicular to the cylinder walls.

The second subregion, R2, was characterized by:

- dimensions (cm): $10 < x < 15$ (if Re >60, x<20) and $0 < y < 5$;
- number of elements: 100.

RESULTS AND DISCUSSION

In this work the physical properties of air were considered to be either constant or temperature and concentration dependent (with adequate changes in the momentum, energy and continuity equations, as shown above). When considered constant, the physical properties were evaluated at $T_R = (T_w+T_\infty)/2$ and $C_R = (C_w+C_\infty)/2$.

Several test problems, extending from pure convection to diffusive-convective non-linear flow recirculation problems, which included problems with Peclet numbers ranging from 0.1 to ∞ were tested (see for instance, Gurgel and Fortes, 1994, Crespo et al., 1995,

for the types of problems solved). The results agreed with the ones available in the literature and they are not presented hereby for brevity (see Barreto, 1993). The following data on heat and mass transfer around cylinders are presented not only for the purpose of application of the model and analysis but also for further confirmation of the methodology.

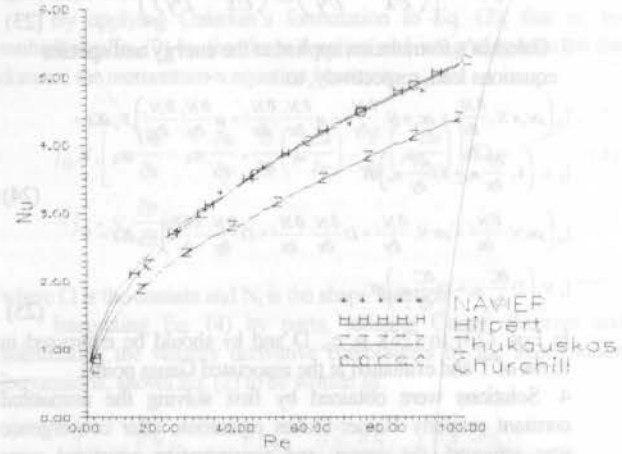


Figure 3. Nu versus Re, for T_w = 25°C and T_∞= 80°C (constant properties)

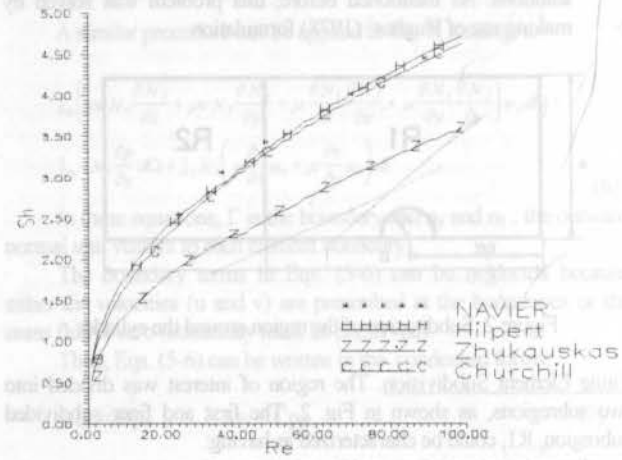


Figure 4. Sh versus Re, for T_w = 25°C and T_∞= 80°C (constant properties)

Figs. 3 and 4 show part of the results when constant properties were assumed. In these figures, the results with the name NAVIER are the ones obtained by means of the FEM. The data shown in Figs. 3 and 4 refer to drying air at 80°C, at an absolute humidity of 0.0099 kg of vapor/kg of dry air; the cylinder surface temperature was kept at 25°C and saturation. Other simulated results involved lower drying air temperatures. As can be seen, the numerical results do not differ from empirically correlated data obtained from Hilpert (1933) and Churchill and Bernstein (1977) (cited by Incropera and Witt, 1992). The numerical simulated results and Hilpert's and Churchill and Bernstein's data differ from Zhukauskas'(1972) (cited by Incropera and Witt, 1992) empirically correlated data. Simulated results for other temperatures revealed analogous results.

Figures 5 to 10 show the numerical results obtained by taking the thermodynamic and transport properties to be temperature and air humidity dependent. The simulation results are again compared against those obtained experimentally by Zhukauskas (1972), Hilpert (1933) and Churchill and Bernstein (1977). The simulation data show that:

- At lower surface and air temperatures, the physical properties are practically constant and, consequently, the numerical results for Nusselt and Sherwood numbers approximate Hilpert and Churchill and Bernstein's experimental data. On the other hand, the numerical results diverge somewhat from Hilpert and Churchill and Bernstein's and approximate Zhukauskas' results for higher T_∞ (Fig. 5 to 8), due to the influence of the variable themophysical properties on the boundary layer profiles.
- Figures 9 and 10 show that Nu and Sh increase when Reynolds numbers rise. These figures also show that, at temperatures higher than 40°C, Nu and Sh decrease significantly as the temperature increases, for the same Re. This fact is, again, due to the variation of the thermodynamics and transport properties.

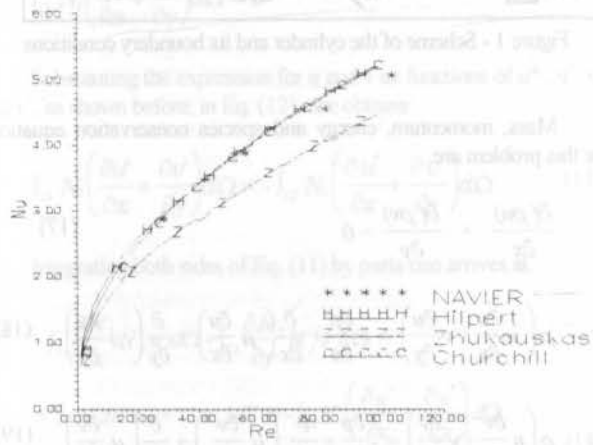


Figure 5. Nu versus Re, for T_w = 25°C and T_∞= 30°C

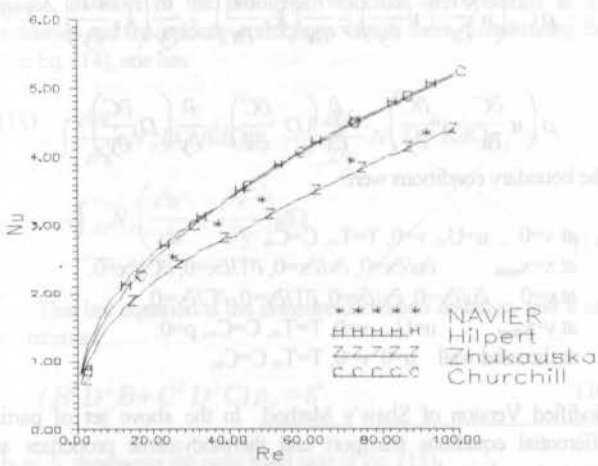


Figure 6. Nu versus Re, for T_w = 25°C and T_∞= 80°C

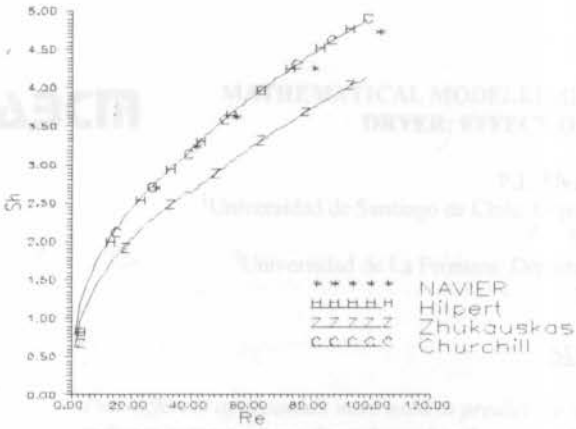


Figure 7. Sh versus Re (T_w = 25°C and T_∞= 30°C)

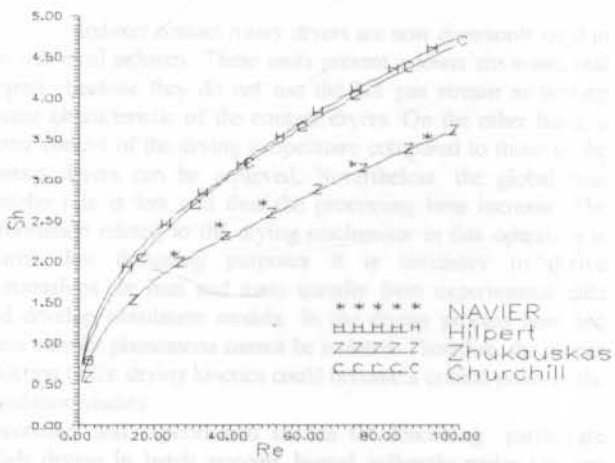


Figure 8. Sh versus Re (T_w = 25°C and T_∞= 80°C)

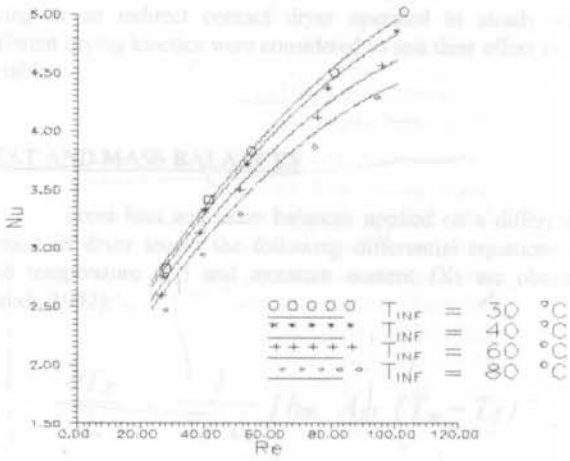


Figure 9. Nu versus Re, for T_w = 25°C with T_∞ as a parameter.

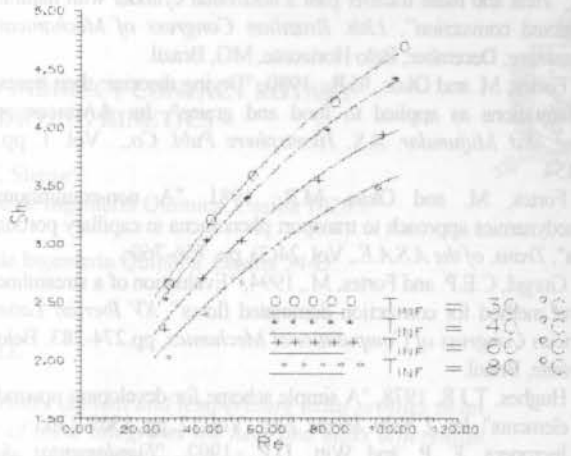


Figure 10. Sh versus Re, for T_w = 25°C with T_∞ as a parameter.

CONCLUSIONS

In this work, a finite element methodology has been developed based upon Shaw (1991) and Hughes (1978) schemes. The main objective was to implement a software to be utilized in forced convection drying simulation studies. The problem of simultaneous energy, momentum and species diffusion around a cylinder was studied for the following simulated conditions: $20<Re<100$, $25<T_w<60°C$ e $30<T_\infty<80°C$. The cylinder was assumed to be porous and its surface to be at saturation; the ambient air absolute humidity was assumed to be 0.0099 kg of vapor/ kg of dry air, which is equivalent to the absolute humidity of air at 25°C and 50% of relative humidity.

The numerical results for Nusselt and Sherwood numbers were compared against available empirical expressions. The results agreed within the associated experimental errors.

When temperature and concentration dependent properties were assumed, there were appreciable difference between numerical and experimental results at higher drying air temperatures.

No effort was made to simulate drying conditions involving wall convective mass flux. However, no restrictions are placed on the proposed methodology which can be expanded, by a simple inclusion of the associated boundary conditions, so as to account for high rate mass transport processes.

Acknowledgments The authors acknowledge the financial support granted by CNPq (National Council for Scientific and Technological Development).

REFERENCES

Brooker, D.B., Bakker-Arkema, F.W. and Hall, C.W., 1974, "*Drying Cereal Grains*", The Avi Publishing Company, Westport, USA.

Barreto A.A. "Transferência Convectiva Forçada de Calor e Massa em Torno de um Cilindro, com Propriedades Variáveis, sob Condições de Secagem", Tese de Mestrado, UFMG, MG.

Brooks, A.N. and Hughes, T.J.R., 1982, "Streamline upwind/Petrov-Galerkin's formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations", *Comput. Meths. in Appl. Mech. Eng.*, Vol. 32, pp. 199-209.

Crêspo, L.C.A., Ferreira, W.R., Fortes, M. and Barreto, A.A. 1995, "Heat and mass transfer past a horizontal cylinder with natural and mixed convection", *13th. Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, December, Belo Horizonte, MG, Brazil.

Fortes, M. and Okos, M.R., 1980, "Drying theories: their bases and limitations as applied to food and grains", In: *Advances in Drying., Ed. Mujumdar, A.S., Hemisphere Publ. Co.*, Vol. 1, pp. 119-154.

Fortes, M. and Okos, M.R., 1981, "A non-equilibrium thermodynamics approach to transport phenomena in capillary porous media", *Trans. of the A.S.A.E.*, Vol. 24(3), pp. 756-760.

Gurgel, C.E.P. and Fortes, M., 1994, "Evaluation of a streamline upwind method for convection dominated flows", *XV Iberian Latin American Congress of Computational Mechanics*, pp.274-283, Belo Horizonte, Brazil.

Hughes, T.J.R, 1978, "A simple scheme for developing upwind finite elements", *Int. J. Num. Meths. Eng.*, Vol. 12, pp. 1359-1365.

Incropera, F. P. and Witt, D.P., 1992, *"Fundamentos de Transferência de Calor e Massa"*, Guanabara Koogan, R.J.

Keey, R.B., 1972, "Drying: - Principles and Practice", Pergamon Press, New York.

Luikov, A.V., 1966, "Application of irreversible thermodynamics methods to investigation of heat and mass transfer", *Int. J. H. Mass Transfer*, Vol. 9, pp. 139-152.

Patankar, S.V., 1980, *"Numerical Heat Transfer and Fluid Flows"*, McGraw-Hill, New York.

Philip, J.R. and De Vries, D.A., 1957, "Moisture movement in porous material under temperature gradients", *Trans. Am. Geoph. Union*, Vol. 38(2), pp. 222-231.

Schnipke, R.J. and Rice, J.G., 1985a, "A monotone streamline upwind finite element method for convection-dominated flows", *Comput. Meths. in Appl. Mech. Eng.*, Vol. 48, pp. 313-327.

Schnipke, R.J. and Rice, J.G., 1985b, "Examination of a new finite element method applied to convection heat transfer", *Finite Element in Analysis and Design*, Vol. 1, pp. 227-239.

Shaw, C.T., 1991, "Using a segregated finite element scheme to solve the incompressible Navier-Stokes equations", *Int. J. Num. Meths. Fluids*, Vol. 12, pp. 81-92.

Taylor, C. and Hughes, T.G., 1981, *"Finite Element Programming of the Navier-Stokes Equations"*, Pineridge Press Ltd., Swansea, U.K

Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L., 1991, *The Finite Element Method*, Vols. 1 and 2, 4th ed., McGraw-Hill, New York.

MATHEMATICAL MODELLING OF AN INDIRECT CONTACT ROTARY DRYER: EFFECT OF THE DRYING KINETICS

P.I. Alvarez[1], C. Shene[2]
[1]Universidad de Santiago de Chile. Departamento de Ingeniería Química. Casilla 10233. Santiago.
[2]Universidad de La Frontera. Departamento de Ingeniería Química. Casilla 54-D. Temuco.

SUMMARY

Two different approaches were used to predict the solid moisture content and temperature axial profiles in an indirect contact rotary dryer heated with steam tubes. One of these integrates the heat and mass differential balances; the other is based on the heat transfer penetration theory. Although both approaches can predict the solid exit conditions, the solid temperature and moisture content profiles differ significatively.

INTRODUCTION

Indirect contact rotary dryers are now commonly used in the fish meal industry. These units present a lower environmental impact because they do not use the hot gas stream as heating source characteristic of the contact dryers. On the other hand, a better control of the drying temperature compared to those in the contact dryers can be achieved. Nevertheless, the global heat transfer rate is low and thus the processing time increase. The information related to the drying mechanism in this operation is scarce. For designing purposes it is necessary to derive relationships for heat and mass transfer from experimental data and develop simulation models. In the drying process heat and mass transfer phenomena cannot be isolated. Therefore, the proper selection of the drying kinetics could become a critical point in the simulation studies.

Theoretical and experimental studies for describing particulate solids drying in batch systems heated indirectly under vacuum conditions or in presence of inert gases has been presented (Tsotsas and Schlünder,1987). Cases where the solids contain free and hygroscopic moisture have been considered. The aim of the present work is to simulate the variables that describe the solid drying in an indirect contact dryer operated in steady state. Different drying kinetics were considered to test their effect on the variable.

HEAT AND MASS BALANCES

From heat and mass balances applied on a differential element of dryer length the following differential equations for solid temperature (T_s) and moisture content (X) are obtained (Parodi, 1992):

$$\frac{dT_S}{dz} = \frac{1}{S_S\ c_h}\left[h_W\ A_{ST}\ (T_w - T_S) - S_S\frac{N}{v}(\lambda_0 + (c_V - c_L)T_S)\right] \quad (1)$$

$$\frac{dX}{dz} = -\frac{N}{v} \quad (2)$$

These equations depend on the dry solid flow rate (S_s) and solid velocity (v) through the dryer, the heating surface temperature (T_w), the heat transfer coefficient between the heating surface and the wet solids (h_w) and physical properties like the vapour (c_v), liquid (c_L) and wet solid (c_h) heat capacities. To obtain the profiles along the dryer Eq. (1) and (2) have to be integrated using the solid inlet conditions. The drying kinetics (N) is assumed proportional to the heat flux from the heating surface to the wet particles:

$$N = \frac{h_W\ A_{ST}\ v}{\lambda_S\ S_S}\ F_x\ (T_w - T_S) \quad (3)$$

To take into account the decreasing drying rate period a factor (F_x) that depends on the critical (X_c) and equilibrium (X^*) moisture contents is considered:

$$F_x = 1 \text{ if } X \geq X_c\ ;\ F_x = \frac{X - X^*}{X_c - X^*} \text{ if } X < X_c \quad (4)$$

A_{ST} is the effective heating surface area per meter of dryer length, i.e. that submersed by the solid particles. This parameter is estimated from the total number of tubes used as heating surface and the dryer volume fraction filled with the solid (ϕ). Solid velocity (v) was calculated from the relationship between the retention time (τ), the solid retention (H) and the total solid mass rate (S_s):

$$\tau = \frac{H}{S_s} = \frac{\phi\pi D^2 L\rho}{4\ S_s} \qquad v = \frac{L}{\tau} = \frac{4\ S_s}{\phi\pi D^2 \rho} \quad (5)$$

HEAT PENETRATION MODEL

The second approach used to calculate the variable profiles is based on the work of Tostsas and Schlünder (1987). In this work it is assumed that the intraparticle resistance to the mass transfer is negligible. The steady mixing process is replaced by a sequence of unsteady mixing steps. During a certain period of length t_R the solid bulk is static. A drying front penetrates from the heating surface into the solid bulk. Between the moving front and the heating surface all the particles are dry; beyond that front all the particles are wet. When the static period ends at $t=t_R$ the bulk is perfectly mixed. After that, the drying front moves again into the bulk. This time, the solid moisture content is lower because of the drying during the first contact period. A scheme of the process is shown in Figure 1.

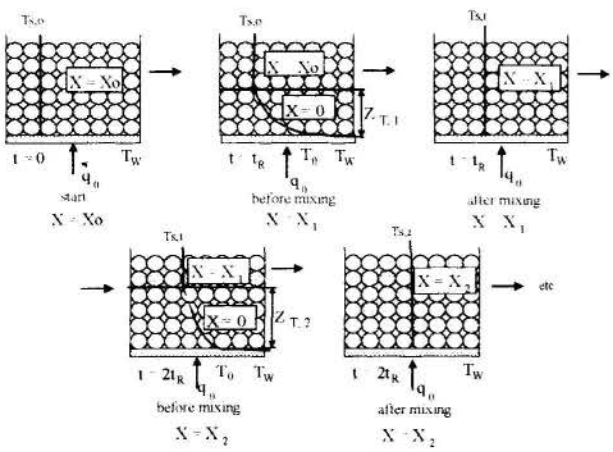


Figure 1. Scheme of the drying process describe through the heat penetration theory (Tostsas and Schlünder, 1987).

In the first period the drying front is at a distance z_T from the heating surface. Above this point solid moisture content and temperature remain constant. With no bounded moisture present, the region between 0 and z_T will be completely dry. This region is approximated by a quasi-continuum media that has thermal properties (effective thermal conductivity(**k**), density (ρ) and heat capacity (c)) of a mixture formed by the solid particles and the gas (vapour) inside them. The process is describe through the following partial differential equation:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \left(\frac{k}{\rho c}\right)_{sb,dry} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \qquad \textbf{(6)}$$

The solid temperature at $z=0$ is $T=T_0$ different to that of the heating surface due to the heat transfer resistance. At $z=z_T$ the solid temperature is $T=T_S$. The other condition to solve Eq. (6) is given by:

$$-k_{sb,dry} \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_{z_T} = \rho_{sb,dry}\, X\, \lambda_{ev} \frac{\partial z_T}{\partial t} \qquad \textbf{(7)}$$

The solution of differential equation in (6) gives the temperature profile in the region between 0 and z_T:

$$\frac{T - T_S}{T_0 - T_S} = 1 - \frac{erf\left[z \sqrt{4\left(\frac{k}{\rho c}\right)_{sb,dry} t}\right]}{erf\ \xi} \qquad \textbf{(8)}$$

where ξ ($\xi = z_T / (4\,(k/\rho\, c)_{sb,dry}\, t)^{0.5}$) is the reduced location of the drying front which can be calculated from:

$$\sqrt{\pi}\xi \exp(\xi^2)\left[\left(\frac{\alpha_{ws}}{\alpha_{dry}} - 1\right) erf\ \xi + 1\right] = Ph\left(\frac{\alpha_{ws}}{\alpha_{dry}} - 1\right) \qquad \textbf{(9)}$$

being α_{ws} the heat transfer coefficient between the wall and the solid particles in contact with wall (Mollekopf, 1983) and Ph the phase-change, a measure of the intensity of the latent heat sink, defined as:

$$Ph = \frac{X\, \lambda_{ev}}{c_{sb,dry}\,(T_w - T_S)} \qquad \textbf{(10)}$$

The overall heat transfer coefficient of the corresponding heating problem, from the heating surface and the bed of dry particles is denoted as α_{dry} is calculated from:

$$\frac{1}{\alpha_{dry}} = \frac{1}{\alpha_{ws}} + \frac{1}{\alpha_{sb,dry}} \qquad \textbf{(11)}$$

where $\alpha_{sb,dry}$ is given by:

$$\alpha_{sb,dry} = 2\sqrt{\frac{(\rho k c)_{sb,dry}}{\pi t_R}} \qquad \textbf{(12)}$$

The overall heat transfer coefficient from the heating surface to the wet solid particles is obtained from:

$$\alpha_{wet} = \frac{\alpha_{ws}}{1 + (\alpha_{ws} / \alpha_{dry} - 1)\, erf\, \xi} \qquad \textbf{(13)}$$

The gradient of the temperature profile at the phase boundary yields the heat flux q_{lat}:

$$q_{lat} = \alpha_{wet}\,(T_W - T_S) \exp\,(-\xi^2) \qquad \textbf{(14)}$$

from this, the drying rate (m) can be calculated as:

$$m = q_{lat} / \lambda_{ev} \qquad \textbf{(15)}$$

The solid moisture content at the end of one contact period is calculated from:

$$X(t + t_R) = X(t) - (m\ t_R\ A) / M_{dry} \tag{16}$$

being A the heating surface area and M_{dry} the mass of the dry material. If the heat transfer from the dry to wet solid particles is null after the mixing takes place then the change in the average solid bed temperature can be calculated from:

$$T_s(t + t_R) = T_s(t) + \Delta X \frac{\lambda_{ev}}{c_{sb,dry} + c_L X}(\exp \xi^2 - 1) \tag{17}$$

The solid moisture content and temperature at the beginning of the next contact period are calculated using Eq. (16) and (17). In this way the drying curve is obtained step by step. The extent of the contact period t_R depends on the geometry of the drying device, its rotation rate and is independent of the solid properties. Parameter t_R has been calculated using (Tostsas and Schlünder, 1987):

$$t_R = t_{mix}\ N_{mix}\ ;\ N_{mix} = \beta\ Fr^{\gamma} \tag{18}$$

being t_{mix} the inverse of the rotation rate of the drying device (1/s). N_{mix} is a parameter that gives account of the mixing degree. The relationship between N_{mix} and the Froud number ($Fr=(2\pi s)^2 D/(2 g)$ given in terms of the rotation rate (s) and diameter (D) of the dryer device) in Eq.(18) has been proposed previously) (Mollekopf, 1983). The value of the constants in this relationship (α and β) depends on the dryer operation conditions and its geometry.

In order to use this methodology to describe the drying process in an indirect contact rotary dryer, it was assumed that the solid particles have a uniform velocity through the dryer (v): during a contact period the solid particles move a distance along the dryer given by the product v t_R. For the simulation purposes of the present work the heat penetration model was applied changing the time increment by a dryer length increment. The ratio A/M_{dry} was estimated from the solid retention (H) and the surface area available for heat transfer per meter of dryer length (A_{S1}):

$$\frac{A}{M_{dry}} = \frac{A_{TS}\ L}{H} = \frac{A_{TS}\ 4}{\phi \pi D^2 \rho} \tag{19}$$

RESULTS AND DISCUSSION

Solid moisture content and solid temperature profiles along the dryer were calculated using the two approaches presented above. Dryer operation conditions (inlet solid temperature T_{SO}, inlet solid moisture content X_O, number of heating tubes n_T, tube diameter d_1, dryer length L and solid particle diameter dp) given in Table 1 were used. These conditions correspond to those used in an industrial drying unit. The outlet solid moisture content reached with these operation conditions is between 0.15 and 0.20 d.b.

Table 1: Operation Conditions used in the Simulations Runs

Dryer		Solid	
ϕ	0.15 m^3/m^3	X^*	0.001 d.b
n_T	160	T_{S0}	80 °C
d_T	0.05 m	S_S	1.2 Kg/s
T_W	200°C	ρ_S	550 Kg/m^3
D	2.7 m	X_0	1.0 d.b
s	9 RPM	dp	0.001 m
L	15 m		

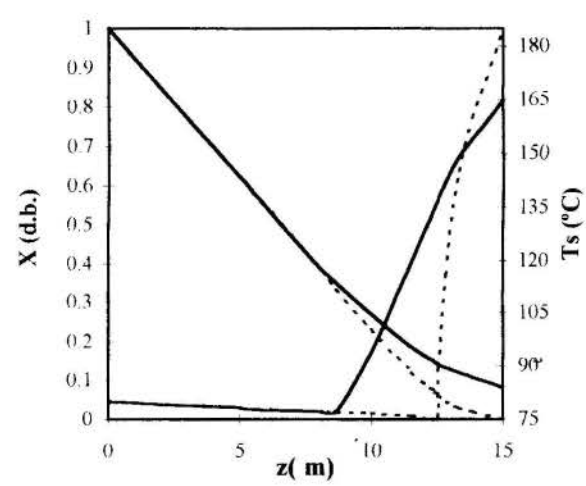


Figure 2. Solid moisture content and temperature profiles calculated using the heat and mass balances for two values of the critical moisture content (---X_c=0.05;— X_c=0.35).

Heat transfer coefficient based on the total heating surface area has been estimated previously from experimental data. Values between 70 and 90 W/m^2 K were found (Ramirez and Promis, 1995). Since the experimental values are based on the total area available for heat transfer the heat transfer coefficient based on the submersed area would have values between 174 and 224 W/m^2 K for the operation conditions shown in table 1. Solid moisture content and temperature profiles for different values of the critical moisture content (0.05 and 0.35 d.b.) using a value of 174 W/m^2 K for the heat transfer coefficient based in the submersed area are shown in Figure 2. It is observed that once the solid moisture content becomes lower than the critical content the solid temperature

increases sharply reaching that of the heating surface. After the solid moisture content has been reduced below the critical content, the drying rate is also reduced ($F_x < 1$) and the heat flux is mainly used to increase the solid temperature.

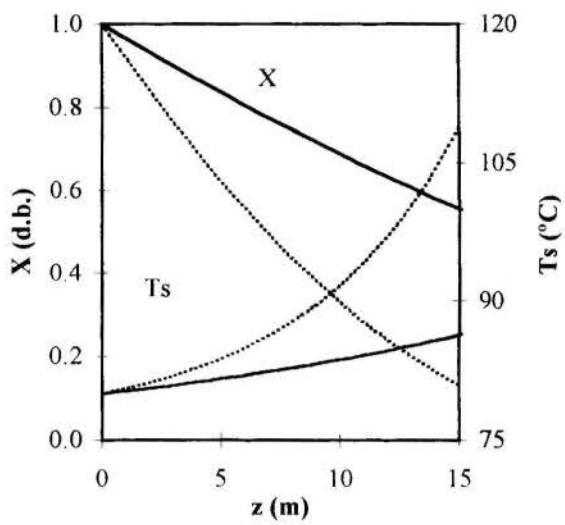


Figure 3. Solid moisture content and temperature profiles calculated using the methodology based on the heat penetration theory for two different relationships between N_{mix} and Fr (--- β =2; — β =16).

The approach based on the heat penetration theory needs no parameter related to the heat transfer. Instead a relationship to take into account of the solid mixing degree has to be given. Figure 3 shows the solid related variable profiles for different values of β(Eq. 18). Values of 16 and 2 were used, being γ equal to 0.2. Simulations using higher values of β show lower values of the outlet solid moisture content. This is because high values of β imply a poor mixing degree. A value of 16 has been recommended for situations where the drying takes place over a heating plate. For the drying process considered in this work a better mixing degree can be achieved because industrial dryers are equipped with internal flights that improve the solid mixing. On the other hand, N_{mix} has also influence on t_R which is inversely proportional to the heat transfer coefficient between the heating surface and the dry particles termed $\alpha_{sb,dry}$ (Eq. 12). So as the mixing number increases a lower heat flux from the heating surface to the dry particles is obtained. Solid moisture content and temperature profiles differ significatively in both cases (Figures 2 and 3). While the first one shows a period of almost constant solid temperature the second predicts a steady increase. To validate the results measurements along the dryer should be carried out.

CONCLUSIONS

Two different approaches were presented to estimate the solid moisture content and solid temperature profiles along an indirect contact rotary dryer. One of them integrates the differential heat and mass transfer balances through the dryer length. This approach needs an estimate of the heat transfer coefficient. The second approach uses a methodology based on the heat penetration theory derived formely to describe a batch drying process. In this case it is necessary to have information related to the solid mixing degree. Nevertheless, it needs no parameter related to the heat transfer. Depending on the approach used to simulate the drying process different profiles were obtained although the same value for the exit solid moisture content can be predicted.

REFERENCES

Mollekopf N., 1983, Ph.D. Thesis, Univ. of Karlsruhe, Germany.

Parodi C., 1992, memoria para optar al título de Ingeniero Civil Químico, Universidad de Santiago de Chile.

Ramírez E., F. Promis, 1995, memoria para optar al título de Ingeniero Civil Químico, Universidad de Santiago de Chile.

Tsotsas E., U. Schlünder, 1985, Chem. Eng. Process. **21**,199-208.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank the economical assistance given by Fondo Nacional de Investigación y Desarrollo through the project Fondecyt 1-95-0489.

CONJUGATE CONVECTIVE DRYING OF MULTIPARTICLE SYSTEMS

Leandro S. Oliveira
Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Minas Gerais
30160-030 Belo Horizonte MG BRASIL

Kamyar Haghighi
Dept. of Agricultural and Biological Eng.
Purdue University
West Lafayette, IN 47907-1147 USA

SUMMARY

A methodology for the analysis of conjugate problems in convective drying of multiparticle systems is presented. In this study, the interface between each particle and the external convective flow is treated as an internal boundary within a two-phase system rather than a geometrical limit. The problems of solid drying and convection boundary layer are connected by expressing the continuity of the state variables and their respective fluxes through the interface. The theoretical aspects are discussed and results are presented for convective trasnport in a linear assemblage of two soybean kernels. The results presented here reinforce the need to take into account particle interactions when studying the drying mechanism of mutiparticle systems.

INTRODUCTION

Considerable work has been done in the past decades on the development of theory and mathematical models for grain drying. Comprehensive reviews of these models and computer simulation methods are available in the literature (Parry, 1985; Cenkowski et al., 1993; Parti, 1993; Waananen et al., 1993). Basically, two distinct types of models have been developed: the deep-bed/thin-layer and the single-kernel models. Most of these models are based on systems of coupled nonlinear partial differential equations where temperature and moisture content are the primary variables. In most cases, the analytical solution of the equations cannot be determined, and an approximate (numerical) solution technique must be used.

Numerical techniques, such as the finite difference, finite element and finite volume methods, have been successfully used to simulate the heat and mass transfer that occur during the drying of grain. However, most of those efforts have been restricted to analyses of single-kernel and deep-bed/thin-layer drying for which simplifying assumptions are made. In the case of single-kernel drying analysis, the temperature and moisture distributions are evaluated inside the kernel only, and the transfer coefficients and external conditions are considered to be constant, uniform and known a priori. For the deep-bed/thin-layer drying analysis, the whole system of kernels is considered as a single porous body, where the transport occurring inside individual kernels is not taken into account. In either case, the interactions among kernels, and between kernels and the surrounding fluid, are neglected. The analysis of drying of a multi-kernel system provides fundamental knowledge for understanding the effects of interaction on the hydrodynamics, and heat and mass transfer characteristics of closely spaced particles.

Modeling the drying of a multi-kernel system by any of the existing theories should take into account the solution of equations for transport within the solid coupled to boundary layer equations as applied to the drying medium. Analytical and numerical solutions are available in the literature for drying models where a conjugate problem was not considered. These solutions were obtained with the assumption that the heat and mass transfer coefficients were known a priori. A problem is usually referred to as conjugate when coupled mechanisms of heat and/or mass transfer within and between different phases in the same system are involved. In the conjugate approach, the effects of the heat and mass transfer within the solid on the transfer in the adjacent fluid are analyzed. This approach eliminates the need for convective heat and mass transfer coefficients. Indeed, these coefficients can be evaluated during the simulation process.

In the analysis of a multi-kernel drying system utilizing a conjugate approach, the transport both inside and outside the kernel are studied, together with the effects of closely spaced kernels on the transfer mechanisms and coefficients. A better understanding of these mechanisms is important for improving the design of existing grain drying systems and for the development of new ones. It is the aim of this work to propose a methodology for the solution of conjugate heat and mass transfer problems in the drying of multi-kernel systems.

THEORETICAL ANALYSIS

This section presents the proposed solution methodology for the conjugate heat and mass transfer that occur in the drying of multi-kernel systems. It also presents the equations used in the solution methodology together with a brief discussion of the approximations and assumptions adopted for the conjugate approach.

In this study, the approach for the solution of conjugate heat and mass transport problems in grain drying consisted of dividing the problem into two, namely the boundary layer and the solid drying analysis, and solving them separately. The coupling between the transfer within the solid and the transfer in the boundary layer was obtained from equations expressing the continuity of both the state variables and their respective fluxes at the interface. In the problems considered here, both heat and mass transfer were moderate and the fluxes through the solid-fluid interface were assumed not to disturb the velocity field. Also, the variations of the air density were ignored and the hydrodynamics analysis relied on a classical incompressible flow treatment.

It is noteworthy to mention that, in the adopted approach, the boundary layer problem was treated as a series of steady-state solutions, whereas the solid drying process was necessarily transient. This assumption was based on the fact that the time scales for the convection process are much smaller than those for the drying process (Masmoudi and Prat, 1991). A detailed discussion of the assumptions and discrepancies underlying the

adopted conjugate approach was presented by Masmoudi and Prat (1991). The equations for this approach are presented next.

Luikov's basic conservation equations for coupled heat and mass transfer in porous body were utilized in the solid drying analysis and are given by

$$\rho_s c_q \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\left(k_q + \varepsilon \lambda k_m \delta' \right) \nabla T + \varepsilon \lambda k_m \nabla U \right] \quad (1)$$

$$\rho_s c_m \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot \left[k_m \delta' \nabla T + k_m \nabla U \right] \quad (2)$$

where $\delta' = \delta / c_m$, T is the temperature, U is the moisture potential, ρ_s is the solid density, c_q and c_m are the respective heat and mass capacities, k_q and k_m are the heat and mass diffusion coefficients, respectively, ε is the phase conversion factor, λ is the latent heat, δ is the thermo-gradient coefficient, and t is time.

The nondimensional form of the equations utilized to describe the convective drying process in the boundary layer are

Continuity

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3)$$

Momentum

$$\vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \vec{u} \quad (4)$$

Energy

$$\vec{u} \cdot \nabla T = \frac{1}{Re\,Pr} \nabla^2 T \quad (5)$$

Conservation of Species

$$\vec{u} \cdot \nabla \omega = \frac{1}{Re\,Sc} \nabla^2 \omega \quad (6)$$

where the Reynolds (Re), Prandtl (Pr) and Schmidt (Sc) numbers are respectively given by

$$Re = \frac{\rho_a l_0 V_\infty}{\mu} \quad (7)$$

$$Pr = \frac{\mu c_p}{k_a} \quad (8)$$

$$Sc = \frac{\rho_a D}{\mu} \quad (9)$$

ρ_a is the air density, V_∞ is a datum velocity, μ is the air viscosity, c_p is the air heat capacity, k_a is the air thermal conductivity, D is the diffusion coefficient of water in air, p is the pressure, ω is the water vapor mass fraction, and l_0 is a characteristic length. The equations expressing the continuity of the state variables and their respective fluxes at the interface were used as boundary conditions for both problems and are given by

$$T_f = T_s \quad (10)$$

$$\omega_f = \omega(T, U)_s \quad (11)$$

$$k_a \nabla T \cdot \mathbf{n} + \lambda \rho_a D \nabla \omega \cdot \mathbf{n} = \left(k_q + k'_m \delta' \right) \nabla T \cdot \mathbf{n} + k'_m \nabla U \cdot \mathbf{n} \quad (12)$$

$$\rho_a D \nabla \omega \cdot \mathbf{n} = k_m \delta' \nabla T \cdot \mathbf{n} + k_m \nabla U \cdot \mathbf{n} \quad (13)$$

where $k'_m = \varepsilon \lambda k_m$, the subscripts f and s represent the fluid and the solid interfacial surfaces, respectively, **n** is the surface unit normal vector, and $\omega(T,U)$ is a function relating the solid local equilibrium moisture content at a certain temperature to the absolute humidity of the air. No slip condition, i.e., $\vec{u} = 0$ is assumed at the solid-fluid interface.

The solution methodology utilized is described next. The boundary layer problem was solved first with boundary conditions of the first kind at the solid-fluid interface. The results of the finite element analysis were used to evaluate the heat and mass fluxes at the interface and these fluxes were then used as boundary condition of the second kind for the solid drying problem that was solved next. An advance in time was performed and the solid drying analysis results at the interface were used as boundary condition for the boundary layer problem. The procedure described is repeated until the final drying time is reached.

The relevant assumptions made in this study are:

- The external flow is assumed to be laminar. This is a reasonable assumption when studying flow through unconsolidated porous medium for which the incidence of turbulence is of doubtful occurrence (Dullien, 1975);
- The solids are assumed to be unsaturated, homogeneous and non-deformable. This is a requirement for the use of Luikov's equations to describe the heat and mass transfer within the solids, since they were derived under these assumptions. The assumption of non-deformability leads to the elimination of the pressure equation from Luikov's model, since the total pressure gradient appears within the material as a result of the resistance of the solid matrix to vapor motion as it shrinks;
- The characteristic length scales of the drying medium are much smaller than those of the external flow. This assumption allows for the imposition of a no-slip condition at the solid-fluid interface (Masmoudi and Prat, 1991);
- The interface dividing the two domains is assumed to be a surface without thickness (Prat, 1990); and
- Instantaneous equilibrium is assumed at each point along the solid-fluid interface at each time step. This assumption provides a means for relating the solid moisture content at its surface with the water vapor mass fraction immediately close to it in the boundary layer.

IMPLEMENTATION

A finite element code was developed to solve the set of equations describing the heat and mass transport in the porous medium. The finite element formulations for the porous medium heat and mass transfer equations were developed following the lines of Thomas et al. (1980). The solution for the boundary layer analysis was obtained by using the commercial software FIDAP (1993). The meshes used were comprised of quadratic triangular elements for the boundary layer analysis and linear triangular elements for the solid drying analysis. The mesh generator developed by Kwok et al (1995) was used to build the meshes.

Heat and mass transport in a linear array of spheres, representing an arrangement of soybean kernels, for which sphericity values are in the range of 85 to 90% (as calculated from data given by Stroshine and Hamman, 1993), is the focus of this section. The effect of forced convection on particle interactions depends on both the relative arrangement of the spheres and the orientation of this arrangement with respect to the flow direction. A linear or tandem arrangement of spheres aligned with the direction of the flow was chosen for this study.

With the linear arrangement, due to maximum interaction between particles, a lower bound for convective heat and mass transfer rates is established. This is in contrast to the single particle case, for which an upper bound for transfer rates is established due to the absence of particle interactions.

Although a linear arrangement of spheres was analyzed, the solution methodology used is generic and applicable to the analysis of transport in fixed, distended, and fluidized beds as well as in single-sphere studies. The approach adopted here somewhat falls into the 'flow around immersed bodies' category when studying flow through porous media. The cylindrical cell model for hydrodynamics problems in multi-sphere systems idealized by Tal et al (1983) was used in the solution of the example problem in this section. Luikov's drying model, for which soybean properties are partially available, are used to describe heat and mass transfer within the individual kernels.

The example problem studied here was that of drying of two soybean kernels in tandem arrangement with no spacing between them. The kernels were placed in an air stream in such a way that both hemispheres were evenly exposed to the airflow. Due to the symmetry of the problem, only half of the two-dimensional domain was used for the analysis (Figure 1).

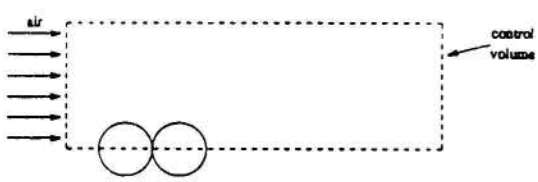


Figure 1 - Drying of two spheres in tandem arrangement.

The conditions of the undisturbed air stream were $T_\infty = 37°C$, $\omega_\infty = 7.02\times10^{-3}$ ($\phi = 18\%$) and $Re = 82$. This Reynolds number corresponds to an air velocity of $v = 0.23\ m/s$. The initial conditions for the soybean kernels were $T_o = 20°C$ and $U_o = 43°M$ (m.c. $\approx 23\%$), where °M is the unit for moisture potential as defined by Luikov (1966). The parameters used in the drying model and the thermophysical properties of the air are presented in Table 1. The drying conditions used here are the same as those used by Overhults et al. (1973) in their experiments on drying of soybeans.

The modified Henderson equation for soybean equilibrium moisture content, as presented by Stroshine and Hamman (1993), was used to evaluate the pointwise equilibrium relative humidity at the interface. Once the equilibrium relative humidity has been evaluated, the water vapor mass fraction (ω) at the interface is then evaluated by means of psychrometric relationships. The results and discussions of the example studied are presented next.

Table 1. Thermophysical properties (Irudayaraj et al., 1990; Kreith and Bohn, 1986).

Prop.	Value	Unit	Prop.	Value	Unit
k_q	0.115	W/mK	ρ	1180.0	kg/m^3
c_q	1884.0	J/kgK	ε	0.3	
c_m	0.005	kg/kgM	λ	0.25×10^7	J/kg
k_m	8.8×10^{-10}	kg/msM	δ	0.01	1/°C
ρ_a	1.025	kg/m^3	μ	19.9×10^{-6}	Ns/m^2
c_p	1017.0	J/kgK	k_a	0.0279	W/mK
D	1.2×10^{-5}	m^2/s	d_p	0.007	m

The velocity vectors for Re = 82 are presented in Figure 2. Notice that there is a weak recirculation zone at the rear of the downstream kernel and also in between kernels.

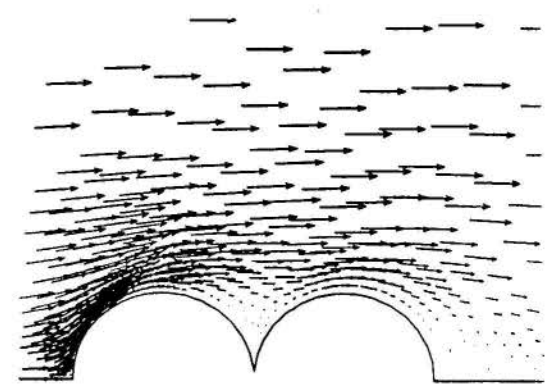


Figure 2 - Velocity vectors for soybean drying problem (Re = 82)

The contour plots for temperature and mass fraction in the boundary layer and the soybeans temperature and moisture potential distributions at the drying times $t = 5$ min and $t = 20$ min are presented in Figures 3 and 4, respectively. These times are representative of the beginning of the process and the time when the average moisture content decreased to 30% of its initial value, respectively. The heat and mass transfer rates for the downstream kernel is significantly different from that of the lead kernel The boundary layer of the lead kernel show higher concentration of temperature and mass fraction gradients than the boundary layer of the downstream kernel does for a drying time of 5 min (Figures 3(a) and (b)). At $t = 5$ min, the temperature of the front portion of the lead kernel is reaching the temperature of the undisturbed stream. The rear portion of the lead kernel and the downstream kernel still are relatively cold and their temperature is far from reaching the undisturbed stream value (Figure 3(a)). The concentration of mass fraction gradients is still higher in the lead kernel boundary layer than it is in the downstream boundary layer at $t = 5$ min (Figure 3(b)). This is due to the fact that the mass transfer process is not as intensive as the heat transfer.

Regarding heat transfer, the array of kernels presented a peculiar behavior at a drying time of 20 minutes (Figure 4(c)). As the front portion of the lead kernel heats up, and the temperature gradient between that portion and the air stream vanishes, the thermal boundary layer moves towards the aft portion of that kernel. The downstream kernel is then exposed to a relatively hotter air which accelerates its heating. At the recirculation zone between kernels, the relatively hotter air coming from the front portion of the lead kernel transfers heat to the front surface of the downstream kernel, before reaching the rear surface of the lead kernel. As a result, a relatively colder air exchanges heat with the rear surface. A further consequence, and contrary to what is expected, is the downstream kernel attaining higher average temperature than the lead one, at the drying time of 20 minutes (Figure 4(c)). Low intensity evaporation at the surface of the downstream kernel also contributed to this phenomenon. Only a small portion of the total heat input was utilized to vaporize water at the surface, with the greater portion being utilized for the heating of the kernel. At that point, the dominating heat transfer mechanism in the downstream kernel seems to be heat conduction. This statement is based on the fact that the contours for temperature of the downstream kernel are symmetric, resembling radial distributions typical of heat conduction problems in spheres. In contrast to what was

discussed above, the average moisture potential of the downstream kernel for $t = 20$ min was lower than that of the lead kernel. Recall that the mass transfer occurs at a much lower rate than the heat transfer.

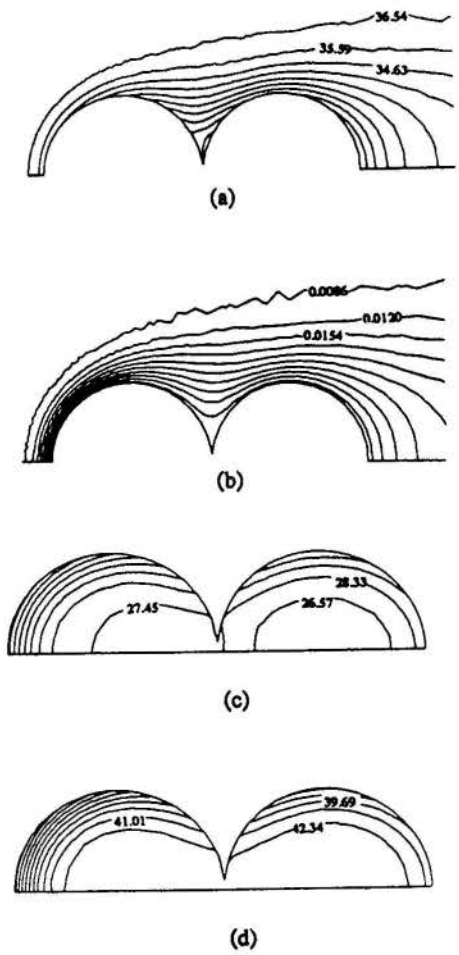


Figure 3 - (a) Temperature and (b) mass fraction isolines for the boundary layer analysis, and soybean (c) temperature and (d) moisture potential distribution for $t = 5$ min.

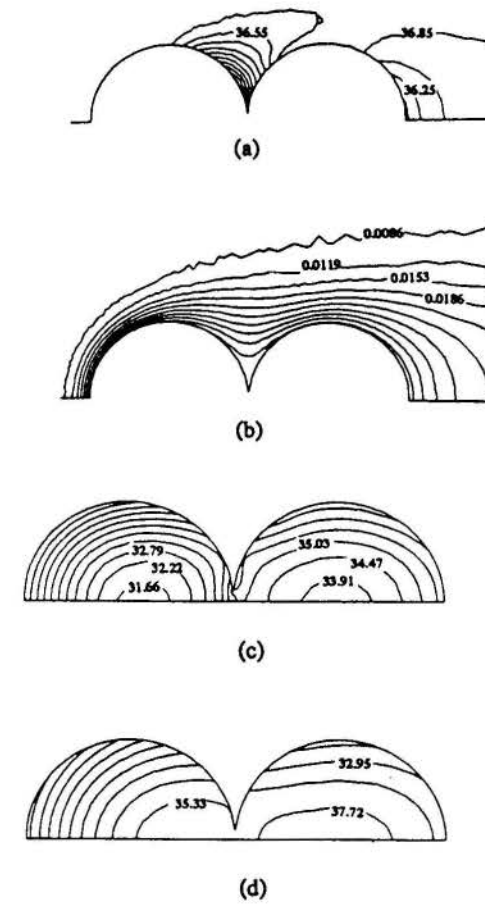


Figure 4- (a) Temperature and (b) mass fraction isolines for the boundary layer analysis, and soybean (c) temperature and (d) moisture potential distribution for $t = 20$ min.

The behavior of the interfacial heat and mass fluxes presented in Figures 5 and 6, respectively, corroborates the discussion above. At the beginning of the drying process, the heat flux decreases along the surface of the lead kernel, in the direction of the airflow. The heat flux at the surface of the downstream kernel presented a maximum at an angular position of about 90°. As drying proceeds, the heat flux at the front portion of the lead kernel decreases very rapidly, whereas at the rear it increases, due to an increase in the temperature gradients (Figure 5(a)). At the surface of the downstream kernel, the heat flux decreases rapidly at a position of about 90° and increases in the front portion (Figure 5(b)) for the same reason as discussed above. Notice that there is a weak recirculation at the rear of the downstream kernel and it has little or no effect on the heat transfer. The mass fluxes at the surface of the kernels did not present significant variation in time, except at the front portion of the lead kernel (Figure 6(a)). The fact that the mass flux at the surface of the downstream kernel did not change in 20 minutes suggests that evaporation at the surface was the controlling mass transfer mechanism at that point in time.

The mass-averaged temperature and moisture content of the assemblage of kernels are presented in Figures 7(a) and (b), respectively. Notice that, even though the front portion of the lead kernel has dried to about 40% of its initial moisture content (Figure 5(a)), the average moisture content of the assemblage is much higher. This is due to the contribution of the high moisture content of the downstream kernel. Both mass-averaged temperature and moisture content curves presented unexpected behavior. The previously described acceleration of the heating of the downstream kernel after 20 minutes of drying was captured by the mass-averaged temperature curve (Figure 7(a)). From that curve and the contour plots in Figures 3 and 4, it can be concluded that, for the greater part of the drying period, the average temperature of the lead kernel was the major contributor to the decrease in the average of the assemblage. As seen in Figure 4(c), at about 20 minutes the average temperature of the downstream kernel becomes the major contributor, causing the sudden change in the slope of the curve in Figure 8(a).

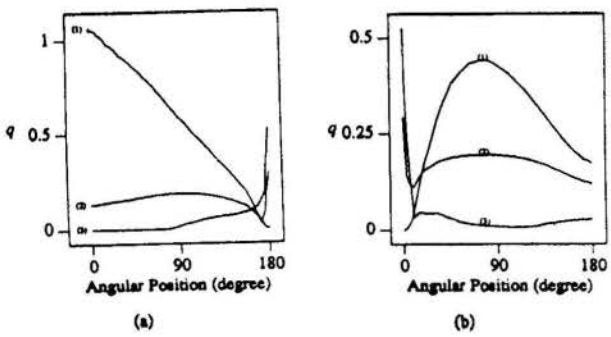


Figure 5 - Heat fluxes at the interface of the (a) lead and (b) downstream kernel for times (1) 2×10^{-2}min, (2) 5 min and (3) 20 min.

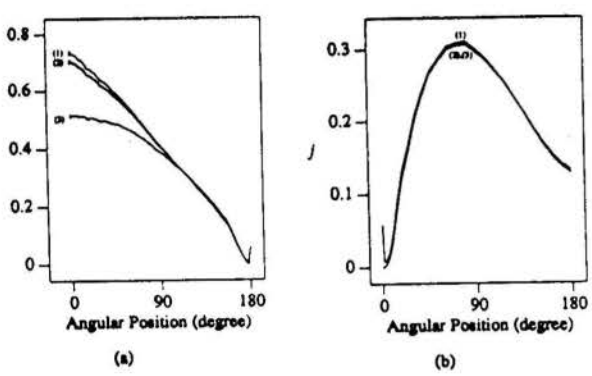


Figure 6 - Mass fluxes at the interface of the (a) lead and (b) downstream kernel for times (1) 2×10^{-2}min, (2) 5 min and (3) 20 min.

In contrast to the mass-averaged temperature, the mass-averaged moisture content curve accelerated at about 10 minutes of drying. A plausible explanation is as follows. As the front of the lead kernel dries, the mass flux in that region decreases, whereas the flux at the rear portion increases by a small amount. As drying proceeds, the fluxes at the interparticle recirculation zone increase (Figures 7(a) and (b)) sufficiently to re-accelerate the drying rate, as the drying front penetrates deeper into both kernels in that region (Figure 4(d)).

According to the experimental results by Overhults et al. (1973), it took about 5 hours for a mass of soybean kernels with an initial moisture content of 23% (d.b.) to dry down to a moisture content of 16% (d.b.). Based on the present study, it took only 20 minutes for an assemblage of two soybean kernels to attain an average moisture content of 16% (d.b.). There are several possible factors that may have contributed to this difference:

1. Overhults and co-workers dried approximately 1500 kernels in a tray of about 0.3m×0.3m. Assuming that it was a square tray, they had at least 40 kernels in a linear array oriented in the direction of the flow. As discussed before, the more kernels there are in the array, the lower will be the average drying rate, due to an increase in particle interactions. It is noteworthy to point out that in the experimental study there were particle interactions in both the direction of the flow and in a direction perpendicular to the flow. This lowers the drying rate even more. Thus, based solely on this reason, an assemblage of two kernels is expected to present a much higher drying rate than an assemblage of 1500 kernels.
2. In the present study, the kernels had their hemispheres evenly exposed to the drying air, whereas in the experiment by Overhults et al. (1973) they did not. In the experimental study the area available for heat and mass transfer was reduced because most of the kernels were in contact with at least four other kernels, and also with the tray. The presence of the tray also causes a reduction in the velocity of the air that flows along the lower hemisphere surface of each kernel. As a result, the average drying rate is much lower.
3. Luikov's model parameters for soybean were partially available and some of them were guessed and not actually experimentally determined (e.g., the mass capacity, c_m, thermo-gradient coefficient, δ).

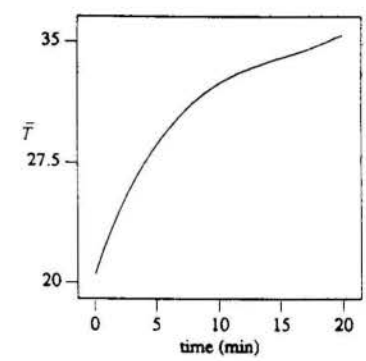


Figure 7 - Mass-averaged temperature for the assemblage of soybean kernels.

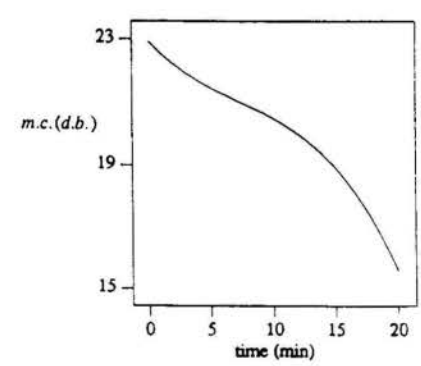


Figure 8 - Mass-averaged moisture content for the assemblage of soybean kernels.

CONCLUSIONS

The methodology proposed and utilized in these studies for the solution of conjugate drying problems presented a reasonably good performance in terms of providing more realistic temperature and moisture content distributions than the usual methods, where model parameters are based on lumped conditions. The accuracy of the results could not be verified due to the lack of experimental data suitable for comparison. The validation of the proposed methodology and verification of results accuracy would be possible if experiments that exactly reproduces the conditions used here were performed. However, experimental studies of multiparticle systems, especially related to mutual interactions, are scarcely reported, if not non-existent.

Regarding computational requirements, the least amount of CPU time spent in the solution of the conjugate problems in these studies was over 60 hours. With the computer resources currently available, the solution of such problems is not practical. Nevertheless, it provides a better insight into the drying mechanisms than the usual methods do. In this study, the analysis of conjugate drying problems showed that both heat and mass fluxes can vary significantly along the drying medium surfaces and also with time. As a result, all problems presented non-uniform heating and drying, demonstrating that extra care should be taken when simulating such drying problems by means of one-dimensional analysis and constant transfer coefficients. Also, the interactions between particles significantly affects the hydrodynamics and heat and mass transfer characteristics of the assemblage as a whole.

REFERENCES

Cenkowski, S., Jayas, D.S. and Pabis, S., 1993, "Deep-bed grain drying - A review of particular theories", *Drying Technol.*, Vol. 11, pp. 1553-1581.

Dullien, F.A.L., 1975, "Single phase flow through porous media and pore structure", *The Chemical Engineering Journal*, Vol. 10, pp. 1-34.

FIDAP, 1993, Users Manual, Revision 7.0, Fluid Dynamics International Inc.

Irudayaraj, J., Haghighi, K. and Stroshine, R.L., 1990, "Nonlinear finite element analysis of coupled heat and mass transfer problems with an application to timber drying", *Drying Technology*, Vol. 8, pp. 731-749.

Kwok, W., Haghighi, K. and Kang, E., 1995, "An efficient data structure for advancing front triangular mesh generation technique", *Com. Num. Meth. Eng*, Vol. 11, pp. 465-473.

Kreith, F. and Bohn, M.S., 1986, "Principles of Heat Transfer", 4th edn., Harper & Row, New York.

Luikov, A.V., 1966, "Heat and mass transfer in capilary porous bodies", Pergamon Press, Oxford.

Masmoudi, W. and Prat, M., 1991, "Heat and mass transfer between a porous medium and a parallel external flow. Application to drying of capillary porous materials", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 34, pp. 1975-1989.

Overhults, D.G., White, G.M., Hamilton, H.E. and Ross, I.J., 1973, "Drying soybeans with heated air", *Trans. ASAE*, Vol. 16, pp. 112-113.

Parry, J.L., 1985, "Mathematical modelling and computer simulation of heat and mass transfer in agricultural grain drying: a review", *J. Agric. Engng. Res.*, Vol. .32 pp. 1-29.

Parti, M., 1993, "Selection of mathematical models for drying grain in thin-layers", *J. Agric. Engng. Res.*, Vol. 54, pp. 339-352.

Prat, M., 1990, "Modelling of heat transfer by conduction in a transition region between a porous medium and an external fluid", *Transport in Porous Media*, Vol. 5, pp.71-95.

Stroshine, R.L. and Hamman, D., 1993, "Physical Properties of Agricultural Materials and Food Products", Published in Manuscript Form by Richard Stroshine, West Lafayette, Indiana.

Tal, R., Lee, D.N. and Sirignano, W.A., 1983, "Hydrodynamics and heat transfer in sphere assemblages - cylindrical cell models", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 26, pp. 1265-1273.

Thomas, H.R., Morgan, K. and Lewis, R.W., 1980, "A fully nonlinear analysis of heat and mass transfer problems in porous bodies", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 15, pp. 1381-1393.

Waananen, K.M., Litchfield, J.B. and Okos, M.R., 1993, "Classification of drying models for porous solids", *Drying Technol.*, 11(1) pp. 1-40.

ENSEÑANZA Y APRENDIZAJE ACTIVO DE LOS FUNDAMENTOS DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR Y MATERIA

Enrique D. Albizzati, Alicia N. Arese, Diana A. Estenoz, Germán H. Rossetti
Cátedra de Fundamentos de la Ingeniería Química - Dpto. de Ing. Qca.
Facultad de Ingeniería Química - U.N. del Litoral
Santiago del Estero 2654 - (3000) Santa Fe - Argentina

RESUMEN

En este trabajo se presenta una experiencia llevada a cabo en los últimos años, sobre la realización de Trabajos Prácticos grupales, con participación activa de los alumnos. Las actividades que se describen están destinadas al diseño, construcción y ensayo de un equipo didáctico para el estudio de los fenómenos de Transferencia de Energía y Materia. La realización del Trabajo Práctico persigue objetivos que van más allá del aprendizaje de contenidos ya que se pretende que el alumno adquiera capacidades, aptitudes y actitudes no contempladas con los métodos de enseñanza tradiconales.

INTRODUCCION

El desempeño profesional del Ingeniero Químico raras veces implica la realización de tareas según una secuencia rígida preestablecida, lo que en general suele caracterizar a las experiencias de laboratorio desarrolladas en gran parte de las asignaturas de la carrera, principalmente en aquéllas de los primeros años, y por ello, en la mayoría de los casos, los estudiantes no tienen oportunidad de apreciar ciertos aspectos de la práctica ingenieril hasta la fase final de la carrera (Scarrah, 1979; Ray Bowen, 1994).

Asimismo, los rápidos cambios de la tecnología generalmente no producen los cambios correspondientes en la educación de los Ingenieros, y en buena parte, la enseñanza de la Ingeniería conserva los métodos tradicionales.

En los cursos se acostumbra a dar demasiado énfasis a los problemas cerrados y claramente enunciados, y muy poco énfasis a la formulación de problemas y a los problemas abiertos en los cuales puede haber más de una respuesta correcta (Ray Bowen, 1994).

Es sabido que para lograr un aprendizaje significativo, no memorístico, de las Ciencias se requiere el dominio del método con que se han construído y se construyen los conocimientos asociados a las mismas (Concari y otros, 1992).

El conocimiento científico se construye a partir de una idealización, abstracción y modelado de la realidad. El modelado no sólo es una estrategia cognoscitiva empleada en las ciencias "puras", sino también una herramienta fundamental en la actividad tecnológica, en el diseño ingenieril (Salinas de Sandoval y otros, 1995a).

Por este motivo, el alumno debe incorporar el pensamiento científico de modo que pueda usarlo a lo largo de la carrera y en su vida profesional, para explicar, modelar y transformar el medio ambiente que lo rodea.

Por otra parte, las situaciones problemáticas y la interpretación y explicación de los fenómenos, son los ejes vertebradores de la construcción científica, como así también de la práctica profesional de los Ingenieros.

Si se pretende aproximar la labor de los estudiantes a una práctica científica, se deberían "planificar actividades guiadas que enfrenten colectivamente a los estudiantes con situaciones problemáticas abiertas, motivadoras y accesibles, que ya hayan sido estudiadas y respondidas en alguna medida por la comunidad científica, y de las que el docente tenga un adecuado manejo" (Salinas de Sandoval, 1995b).

En la Cátedra de Fundamentos de la Ingeniería Química se desarrollan estrategias de enseñanza que propenden a la participación de los alumnos en situaciones problemáticas similares a las de su futuro desempeño profesional, donde pueden utilizar resignificados, los conocimientos y los procedimientos científicos, y en las cuales las tareas generalmente no involucran actividades que siguen un orden estricto ni la obtención de soluciones únicas.

Fundamentos de la Ingeniería Química es una materia que se cursa en 3° año de la Carrera de Ingeniería Química. Es de transición desde las materias básicas (Matemáticas, Física, Química, Termodinámica, Cálculo Numérico y Computación) e introductoria de las materias del ciclo de Formación Profesional (Operaciones Unitarias, Ingeniería de las Reacciones Químicas, Instrumentación y Control de Procesos). En esta asignatura se estudian los Fenómenos de Transferencia de Cantidad de Movimiento, de Energía y de Materia, así como las Ecuaciones de Balance Integrales y Locales de estas propiedades.

En los últimos años el número de alumnos promedio fue de veinte (20) por semestre, período que abarca el cursado y los correspondientes exámenes.

Este trabajo se refiere a una experiencia llevada a cabo en los últimos años, relacionada con Trabajos Prácticos grupales. A partir de 1989 se procedió a revisar y modificar la metodología de enseñanza y aprendizaje, y las mayores innovaciones se realizaron en el Trabajo Práctico y en la evaluación de la asignatura. En las otras actividades - clases teóricas y de resolución de problemas - los cambios han sido menores, pero debe observarse que las mismas abarcan una gran parte del tiempo asignado al desarrollo del programa (Albizzati y Arese, 1994).

Las actividades que se realizan durante el Trabajo Práctico están destinadas al diseño, construcción y ensayo de un equipo didáctico, y se encuadran en lo que se conoce como "método de proyectos", con participación activa de los estudiantes que cursan la asignatura.

Los equipos que aquí se describen están orientados al análisis fenomenológico y conceptual, y a la medición de propiedades de transporte y coeficientes de Transferencia de Energía y Materia.

La realización del Trabajo Práctico persigue objetivos que van más allá del aprendizaje de contenidos ya que se pretende que el alumno adquiera capacidades, aptitudes y actitudes no siempre contempladas a través de otros métodos de enseñanza y aprendizaje: se estimula el pensamiento creativo, el análisis crítico, el razonamiento y la iniciativa personal de los estudiantes, entre otros. Los referidos aspectos no necesariamente están todos involucrados en las metodologías tradicionales aplicadas en los trabajos prácticos de las carreras de Ingeniería.

CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO PRACTICO

Con respecto al Trabajo Práctico, tiene características extra - áulicas y de trabajo grupal, efectuándose con la participación activa de los estudiantes, y puede encuadrarse dentro del "método de proyectos" (Nérici, 1980). Consiste globalmente en el planeamiento, ejecución y comunicación escrita y oral de un proyecto, relacionado con el diseño, construcción y ensayo de un equipo didáctico destinado al estudio de uno de los temas de la asignatura.

Durante la realización del Trabajo Práctico, a cada grupo se le asigna un docente asesor quien, a requerimiento de los integrantes, los orienta durante la preparación y ejecución del trabajo, y supervisa el desarrollo de las actividades teniendo en cuenta los objetivos que se persiguen.

En el Trabajo Práctico, los estudiantes desarrollan un tema elegido por ellos mismos a partir de las propuestas efectuadas por la cátedra y en el marco de los contenidos del programa. En función de la complejidad del tema, tiempo estimado de concreción y particularidades de cada trabajo, el número de estudiantes por comisión varía entre dos y tres. La integración de los grupos surge de los propios alumnos.

Las actividades se programan de forma tal que cada tema es abordado por más de un grupo, en progresivas etapas. Las tareas se encadenan y los resultados obtenidos por un grupo en un determinado período son revisados en el período siguiente por otro grupo el cual luego planifica y ejecuta sus propias actividades. De este modo se completa el estudio de un tema, con el aporte sucesivo de varias comisiones.

En general los Trabajos Prácticos se desarrollan según las etapas que se listan en el Cuadro 1.

Cuadro 1: Desarrollo del Trabajo Práctico

Etapas
- análisis teórico
- diseño y construcción de equipos
- modelado o simulación
- obtención de datos experimentales
- interpretación de resultados
- elaboración de conclusiones
- mejora de detalles constructivos
- perfeccionamiento de técnicas de medición

En todos los casos, en principio se contemplan aspectos teóricos, se profundizan conocimientos impartidos previamente en la asignatura, se realizan conceptualizaciones y estudios analíticos a partir de artículos publicados en libros y revistas técnico - científicas, los que se recopilan mediante búsquedas bibliográficas. El material escrito elaborado en estos casos incluye las propuestas destinadas a dar continuidad al tema en estudio a través de trabajos experimentales.

Luego se efectúa un análisis comparativo de la información relacionada con los métodos experimentales disponibles y, considerando los recursos técnicos y materiales, así como las posibilidades de concreción en plazos razonables, se selecciona el dispositivo de acuerdo a los objetivos generales planteados.

La etapa de modelado y simulación del sistema en estudio se realiza según las necesidades, previamente al diseño en algunos casos o con posterioridad al mismo en otros. De este modo puede predecirse el funcionamiento de los equipos para contribuir a la selección del instrumental de medición, elaboración de técnicas operatorias, dimensionamiento de instalaciones complementarias, etc.

En lo referente a las determinaciones experimentales, las mismas se concretan en los equipos previamente desarrollados. Los datos de las experiencias se contrastan con información obtenida por otras vías y se interpretan con el fin de extraer conclusiones sobre los modelos teóricos aplicados, para proceder a su reformulación en caso de ser necesario. Además se efectúa un análisis crítico de las tareas realizadas, lo que habitualmente da lugar a la corrección de detalles constructivos y al perfeccionamiento de las técnicas de medición utilizadas en cada caso.

Para realizar los trabajos se cuenta con la colaboración de los Talleres Mecánico y de Vidrio de la Facultad, y se dispone de la Planta Piloto con servicios de agua, vapor, aire comprimido, vacío y electricidad, los que se usan según los requerimientos de los mismos.

Una vez finalizado el Trabajo Práctico, los alumnos exponen oralmente los resultados del trabajo al resto de los estudiantes y a los docentes, durante aproximadamente treinta minutos cada grupo, incluyéndose un período de discusión conjunta del tema. Asimismo, presentan un informe escrito, estructurado de forma que se pueden distinguir: introducción, exposición de los aspectos teóricos y experimentales, discusión, conclusiones, bibliografía e índice.

EQUIPAMIENTO DIDACTICO

A continuación se refiere a aquellos aspectos más significativos relacionados con los equipos didácticos en desarrollo. En el Cuadro 2 se listan los temas encarados hasta el momento en las áreas de Transferencia de Energía y Transferencia de Materia.

Se ha diseñado y construído un primer conjunto de equipos teniendo como base los esquemas y detalles de la bibliografía - que incluye experiencias "típicas" para el estudio de estos temas - pero modificando varias de las propuestas en lo relativo a objetivos, modelos teóricos, elementos constructivos e instrumental de medición, alcanzando así una modalidad propia en la aplicación de cada uno de estos equipos didácticos.

Como ejemplo de las tareas realizadas en el tema Transferencia de Energía se pueden citar los equipos para medición de conductividad térmica de un aislante según la propuesta de Molyneux (1969) y la determinación de perfiles de temperatura en barras sólidas (Crosby, 1968).

En el primer caso se ha incluído el estudio de la variación de la conductividad térmica del aislante con la temperatura, y en el segundo el efecto de la temperatura sobre el valor del coeficiente local de transferencia de energía desde la superficie de la barra al ambiente. Además se estudia la incidencia del flujo de aire sobre la transferencia de calor mediante convección forzada y convección natural.

Cuadro 2. Equipos desarrollados

Transferencia de Energía

- Conductividad térmica de un aislante
- Perfiles de temperaura en barras metálicas
- Calentamiento de un líquido en tanque agitado
- Colector solar plano para calentamiento de agua
- Transferencia de calor desde superficies planas
- Intercambiador de calor de tubos concéntricos

Transferencia de Materia

- Difusividad de vapores en aire
- Perfiles de concentración de sal en queso
- Transferencia de materia desde gotas a líquidos
- Disolución de sólidos en líquidos agitados
- Aereación de líquidos residuales
- Evaporación desde película descendente

Otros desarrollos clásicos relacionados con esta área son el cálculo y la verificación experimental de coeficientes totales e individuales de transferencia de calor en un tanque agitado con serpentín interno y en un intercambiador de tubos concéntricos (Crosby, 1968). En ambos equipos el calentamiento se efectúa utilizando vapor de agua a baja presión.

En el tanque agitado se investiga la variación del coeficiente total de transferencia de energía con el tiempo y con la velocidad del agitador. En los trabajos prácticos empleando el intercambiador de tubos concéntricos, se ha determinado el efecto del caudal másico de fluido calentado sobre el coeficiente total y el coeficiente convectivo interno de transferencia de energía usando el método de Wilson (Greenkorn y Kessler, 1972).

Con respecto a los experimentos tradicionales en Transferencia de Materia, se ha medido la difusividad de distintos vapores orgánicos en aire haciendo uso de un dispositivo termostatizado (Molyneux, 1969). Se analizó la influencia de la temperatura sobre el valor de la propiedad para verificar las expresiones usadas para predicción de la difusividad (Reid y otros, 1987).

También se ha determinado el valor del coeficiente convectivo de transferencia de materia en la fase gaseosa empleando una columna con película de agua descendente. Para medir la humedad y temperatura de la corriente de aire a la salida del equipo se utiliza un termohigrómetro portátil, hallándose en las experiencias la variación del coeficiente de transferencia con el caudal de aire circulante (Molyneux, 1969).

Se efectúa paralelamente un estudio relacionado con la formación de la película descendente y el efecto del caudal circulante sobre dicha conformación.

En los restantes temas que se han mostrado en el último cuadro, en función de las características de la información bibliográfica, se procedió al diseño y construcción a partir de una elaboración propia de los estudiantes, y a la vez a planificar el modo de uso de los equipos didácticos desarrollados.

Aunque las pautas seguidas en estos dispositivos fueron análogas a las aplicadas en la adaptación de los equipos clásicos referidos con anterioridad, puede decirse que en general el avance fué más lento.

En todos los casos ello dio lugar a un análisis más crítico, surgieron mayores discusiones en lo que respecta a detalles constructivos, modelado teórico, técnicas de medición e interpretación de resultados experimentales. Fue necesario contrastar la información obtenida con la proveniente de revistas y libros, se reformularon los modelos y se redefinieron los objetivos del Trabajo Práctico en función de las primeras conclusiones elaboradas.

Dentro de este grupo puede incluirse el dispositivo para estudiar la Transferencia de Energía desde una superficie plana (Incropera y De Witt, 1990). Para efectuar el estudio se adoptó la forma de placa circular, analizándose el efecto de tipo de superficie sobre el valor del coeficiente de transferencia de energía y del flujo de calor transferido por los mecanismos de convección natural y de radiación térmica. Las experiencias se llevaron a cabo con superficies de acero inoxidable muy pulido y con la misma superficie cubierta con una pintura negra mate. Los resultados experimentales sirvieron para discutir sobre las restricciones de las correlaciones propuestas en la bibliografía.

En lo relativo al calentamiento de agua utilizando energía solar se construyeron colectores solares tipo compacto (Garg y Rani, 1982) con una placa negra absorbente de la radiación solar. Uno de los colectores posee la cubierta transparente a la radiación, de vidrio común y el restante de policarbonato alveolar; ambos materiales tienen el mismo espesor.

Se realizaron determinaciones de la eficiencia térmica de los equipos operados en forma discontinua, bajo diversas condiciones de irradiación solar y en diversas épocas del año, concluyéndose sobre las condiciones que redundan en un mayor rendimiento de cada uno de los colectores de placa plana construídos.

Los trabajos sobre Transferencia de Materia desarrollados, incluyeron el estudio de los perfiles de concentración de cloruro de sodio en la etapa de maduración de quesos de pasta semidura. Para ello se elaboraron quesos tipo Pategras, hallándose la variación de la concentración salina con el tiempo y con la posición radial en quesos cilíndricos cuyas caras inferior y superior fueron recubiertas con el objeto de permitir la penetración de sal sólo por la superficie lateral. El modelo teórico que describe el sistema fue verificado a través de los resultados experimentales (Meinardy y otros, 1995).

Otros equipos didácticos se destinaron al análisis de los fenómenos de transferencia de materia entre dos fases (líquido-líquido, sólido-líquido y gas-líquido). Los dispositivos se usaron para estudiar el flujo de ácido propiónico desde gotas de benceno hacia agua, disolución de esferas de naftalina en soluciones acuosas de etanol y aireación en tanques agitados, de suero residual de la fabricación de quesos.

Uno de los dispositivos básicamente está constituído por una columna donde se forman y ascienden gotas de benceno que contienen ácido propiónico. El ácido se transfiere desde la gota a la fase continua, que es agua (Camacho Rubio y otros, 1981). Se halla el coeficiente promedio de transferencia de materia entre ambas fases para el período de formación y ascenso de la gota.

Para estudiar la aireación de suero residual proveniente de la fabricación de quesos se construyó un tanque provisto de un agitador con regulador de velocidad. La concentración de oxígeno disuelto en el líquido se midió empleando un equipo portátil con sensor descartable; los datos experimentales permitieron hallar la velocidad de disolución del gas a través del tiempo (Eckenfelder, 1991).

Finalmente la transferencia de materia desde sólidos a fluidos se llevó a cabo también en un tanque agitado (Miller, 1971) disolviendo esferas de naftaleno en soluciones acuosas de etanol. La variación de la concentración de naftaleno en un fluido se determinó tomando periódicamente muestras, las que fueron analizadas con un espectrofotómetro.

Como en los casos antes descriptos, se ha pretendido comparar los valores resultantes de las experiencias efectuadas con

las correlaciones propuestas en la bibliografía, modificándose durante la etapa experimental diversas condiciones de trabajo, por ejemplo, cambiando la velocidad característica de cada fenómeno. Se efectuaron estudios paramétricos y se analizó el rango de validez de las expresiones aplicadas.

Debe observarse que en los Trabajos Prácticos que involucran Transferencia de Materia, dadas las necesidades que se presentan (empleo de instrumental para las determinaciones analíticas y aplicación de técnicas volumétricas de análisis) se cuenta con la colaboración de otros laboratorios de la Facultad de Ingeniería Química especializados en esta área.

CONCLUSIONES

El desarrollo del Trabajo Práctico da lugar a que el estudiante aborde situaciones que pueden resolverse según variados enfoques, propiciando de esta manera la estimulación del pensamiento creativo, el análisis crítico, el razonamiento y la iniciativa personal de los estudiantes.

También posibilita una relación más intensa con Centros de Documentación, Gabinete de Informática, Institutos de Investigación, Cátedras y Laboratorios, Talleres de Vidrio y Mecánico, y Servicios de Planta Piloto.

Se ha observado gran interés por parte de los estudiantes en participar en actividades de este tipo, resultando muy motivante la posibilidad de ver su diseño construido y utilizado. Además se evidencia sentido de responsabilidad debido a que saben que los resultados por ellos obtenidos serán utilizados por sus pares en los cursos sucesivos, y el logro de los objetivos propuestos sirve al aprendizaje de todos.

El trabajo en grupo favorece la formación en el campo de las relaciones interpersonales y el desarrollo de capacidades de liderazgo, lo cual resulta beneficioso para el futuro Ingeniero considerando que la carencia de estos atributos va en desmedro de su desempeño profesional, aún cuando cuente con las capacidades técnicas requeridas.

Aunque la metodología aplicada exige de los docentes mayor capacitación, dedicación, esfuerzo y tiempo, por otro lado resulta una fuente de estímulos y una experiencia gratificante.

La realización del Trabajo Práctico contribuye a un conocimiento más profundo del alumno y por lo tanto se lo puede evaluar mejor, ya que las oportunidades de interacción con ellos van más allá de los horarios de clases. Además brinda buenas oportunidades para el ejercicio de la comunicación lo cual es útil, teniendo en cuenta la dificultad real que representa para los estudiantes de Ingeniería la expresión oral y escrita.

REFERENCIAS

Albizzati, E. y Arese, A., 1994, "Experiencias innovadoras en la enseñanza y el aprendizaje de los Fundamentos de la Ingeniería Química", *Memorias del III Encuentro Interamericano de Educación en Ingeniería y Tecnología*, Río de Janeiro, Brasil.

Camacho Rubio, F., González Tello, P., Jurado Alameda, E., 1981, "Extracción líquido-líquido en columna de gotas", *Anales de Química, Serie A*, Vol. 77, pp.256-263.

Concari, S., Alzugaray, G., Arese, A. y Pozo, R., 1992, "El trabajo de investigación como recurso didáctico en la enseñanza de la Física", *Memorias del I Encuentro Internacional de Educación en Física y III Encuentro Nacional de Profesores de Física*, Montevideo, Uruguay.

Crosby, E. J., 1968, "Experimentos sobre Fenómenos de Transporte en las Operaciones Unitarias de la Industria Química", Ed. Hispano Americana S.A., Buenos Aires.

Eckenfelder, W. W., Jr., 1991, "Principles of water quality management", Ed. Krieger Publishing Company, Florida.

Garg, H.P. y Rani, U., 1982, "Theoretical and experimental studies on collectors/storage type solar water heater", *Solar Energy*, Vol. 29, N° 6, pp. 467-478.

Greenkorn, R. A. y Kessler, D. P., 1972, "Transfer Operations", Ed. Mc Graw-Hill Book Company, New York.

Incropera F., De Witt D., 1990, "Fundamentals of heat and mass transfer", 3rd. Ed., Ed. J. Wiley & Sons, New York.

Meinardy, M., Iucci, E., Santarelli, S., Albizzati, E., Meinardi, C., 1995, "Perfiles teóricos y experimentales de la concentración de sal durante la maduración de quesos", trabajo presentado en el *XI Congreso Regional de Iniciación Científica y Tecnológica en Ingeniería*, Caixas do Sul, Brasil.

Miller, D., 1971, "Scale-up of agitated vessels", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, Vol. 10, N° 3, pp. 365-375.

Molyneux, F., 1969, "Ejercicios de Laboratorio de Ingeniería Química", Ed. Blume, Madrid.

Nérici, I., 1980, "Metodología de la enseñanza", Ed.Kapelusz Mexicana, México.

Ray Bowen, J., 1994, "Engineering Education for the 21st. Century", trabajo presentado en el *III Encuentro Interamericano de Educación en Ingeniería y Tecnología*, Río de Janeiro, Brasil.

Reid R., Praunitz J., Poling B., 1987, "The properties of gases and liquids", 4th. Ed., Ed. Mc Graw Hill, New York

Salinas de Sandoval, J., Gil Pérez, D., C. de Cudmani, L., 1995a, "La elaboración de estrategias educativas acordes con un modo científico de tratar las cuestiones", *Memorias IX Reunión de Educación en Física (REF IX)*, pp. 336-349, Salta.

Salinas de Sandoval, J., Gil Pérez, D., C. de Cudmani, L., 1995b, "¿Cómo adecuar las estrategias educativas a los requerimientos de modelos de aprendizaje basados en psicologías constructivistas?", *Memorias IX Reunión de Educación en Física (REF IX)*, pp. 350-362, Salta.

Scarrah, W., 1979, "The design of a Unit Operations Laboratory based on Piagetian concepts", *The Modern undergraduate laboratory: innovative techniques, AIChE Symposium Series, American Institute of Chemical Engineers*, N° 183, Vol. 75, pp. 26-28.

Agradecimientos: Los autores agradecen a la Universidad Nacional del Litoral (Programación CAI+D 93-94, N° 181) por su contribución al presente trabajo.

ABSTRACT

This paper presents an experience carried out during the last years, about Practical Works developed in groups with very active students' performance. The activities being described aim to the design, construction and testing of a didactic equipment for studying Energy and Mass Transfer phenomena. This Practical Work, going beyond the content's learning, intends the students to acquire capacities, skills and attitudes not considered in traditional teaching methods.

DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA DE CONTROLE PID POR COMPUTADOR PARA BANHO TERMOSTATO - TROCADOR DE CALOR (CASCO - SERPENTINA)

Luiz F. M. de Santana, Roberto de Sousa e Ari J. C. Pereira
DEM/PEM/COPPE
Universidade Federal do Rio de Janeiro
Caixa Postal 68503, CEP - 21945-900, Rio de Janeiro - RJ - Brasil

RESUMO

Este trabalho descreve o desenvolvimento de um sistema de controle PID por computador, para uma bancada didática de controle de temperatura utilizando um banho termostato - trocador de calor (casco - serpentina). Com esta bancada é possível fazer a aferição e a calibração de sensores de temperatura, bem como verificar a aplicação dos controladores PID em um banho termostato - trocador de calor, representativo de um processo industrial.

INTRODUÇÃO

O uso de sistemas de controle na engenharia moderna é de enorme importância no perfeito funcionamento de equipamentos e sistemas industriais que, de uma forma geral, requerem atuações nesses sistemas, procurando aumentar o grau de qualidade do processo e também diminuir sua margem de risco.

Atualmente, desejando alcançar este objetivo, o computador é utilizado como supervisor de tais processos. Aplicando técnicas do final do século passado, meados deste século e mais atuais, como é o caso do *controle digital*, os sistemas de controle com o auxílio de computadores procuram melhorar a obtenção dos resultados dos processos mais delicados e diminuir seu grau de risco, permitindo a obtenção de produtos de melhor qualidade mesmo diante de condições extremamente críticas para a sua produção.

O trabalho em questão, apresenta uma análise do projeto de um sistema de controle de temperatura de um banho termostato-trocador de calor casco-serpentina, visando manter a temperatura do banho em um valor pré-determinado. O sistema projetado, procura exemplificar a utilização de sistemas de controle em processos de transmissão de calor, onde a temperatura é a variável a ser mantida dentro de níveis especificados.

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

O Sistema de Controle Por Realimentação

O sistema de controle por realimentação é a forma de controle mais utilizada a nível industrial. Consiste basicamente na comparação entre os níveis de entrada e saída de um sistema. Quando a saída é diferente da entrada, há geração de um sinal de erro como resultado desta comparação e, em função deste erro, efetua-se uma ação de controle sobre o sistema de maneira a levar a saída a um novo valor que, quando comparada outra vez com a entrada, gere o menor erro possível (idealmente nulo). A saída que é obtida através de um elemento sensor, é comparada com uma referência pelo controlador, que por sua vez gera o sinal de erro e através de sua função interna, que varia em função do tipo de controle exercido, envia um sinal de saída para o elemento final de controle, o qual vai atuar sobre o processo própriamente dito, tendendo a minimizar o erro gerado.

A análise de sistemas com realimentação pode ser feita através das funções de transferência, as quais expressam a relação matemática entre a entrada e a saída dos blocos quando as condições iniciais são nulas. Estas funções no tempo são mais facilmente trabalhadas na forma de suas correspondentes transformadas de Laplace. A combinação das funções de transferência de cada bloco, obtida através da álgebra dos diagramas de blocos, fornece a função de transferência do processo como um todo. Maiores detalhes podem ser vistos nas referências apresentadas.

A figura a seguir, mostra a representação em diagrama de blocos de um sistema de controle por realimentação típico.

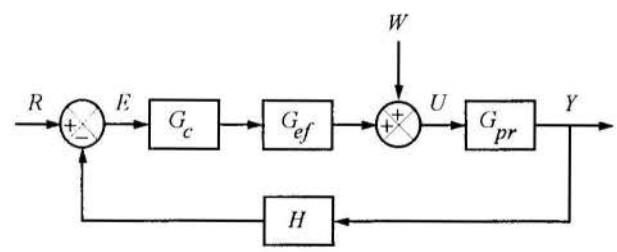


Figura 1 - Representação de um Sistema com Realimentação

onde:

R = entrada ou *set-point*
G_c = função de transf. do controlador
G_{ef} = função de transf. do elemento final de controle
G_{pr} = função de transf. do processo mais o retardo por transp.
Y = saída
H = função de transf. do elemento de medida
W = perturbação

Analisando cada um destes blocos, têm-se as seguintes relações entre a entrada e a saída para cada um deles, no domínio da Transformada de Laplace:

R - Possui um valor constante, correspondente a aplicação de um impulso na entrada do sistema. Neste caso, representa o *set-point* fornecido ao programa que gerencia o controle ou a temperatura que se deseja obter no controle do sistema projetado, é fornecido em milivolts.

G_c - É a função de transferência do controlador. Como o sistema utiliza um controlador PID, a transformada de Laplace de sua saída é dada pela Eq. (1):

$$G_c = K_c\left[1 + \frac{1}{\tau_i s} + \tau_d s\right] \qquad (1)$$

onde K_c é o ganho proporcional, τ_i é o tempo integral e τ_d é o tempo de reset ou derivativo, cujos valores são obtidos experimentalmente através do ajuste de parâmetros de Ziegler-Nichols para controladores PID.

G_{ef} - É a função de transferência do elemento final de controle. Sabendo que para sistemas de primeira ordem a função de transferência é dada pela Eq. (2), onde τ é a constante de tempo e que quando a dinâmica é desprezível a mesma função tende para 1 temos:

$$G_{ef} = \frac{1}{\tau s + 1} \quad \text{e como } \tau << 1 \text{ vem } G_{ef} = 1 \qquad (2)$$

Os elementos finais de controle utilizados neste projeto apresentam constantes de tempo muito baixas que, embora não nulas, podem ser desprezadas tornando a função de transferência do elemento final de controle aproximadamente igual a 1.

G_{pr} - É a composição da função de transferência do processo mais o retardo por transporte. A constante de tempo do processo e o tempo morto foram obtidas através de análises experimentais utilizando malha aberta ou seja, sem realimentação. Posteriormente, a função com retardo foi obtida através de uma expansão em Série de Taylor tomando-se apenas o primeiro termo da série. A função composta então foi obtida através da Eq. (3):

$$G_{pr} = R_t \frac{1}{\tau s + 1} e^{-\tau_m s} \cong R_t \frac{1}{\tau s + 1} \cdot \frac{-s + 2/\tau_m}{s + 2/\tau_m} \qquad (3)$$

Os valores numéricos da constante de tempo do processo e do retardo serão vistos mais adiante.

H - É a função de transferência do elemento sensor. É uma função de primeira ordem tendo a mesma forma que a função de transferência G_{ef}. O valor da constante de tempo τ_h também será fornecido mais adiante.

W - Representa uma perturbação sofrida pelo sistema, podendo ocorrer em qualquer parte do mesmo.

Analisando a equação completa deste sistema linear, através das técnicas de redução de diagrama de blocos, chega-se a Eq. (4):

$$Y(s) = \frac{G_c G_{ef} G_{pr}}{1 + G_c G_{ef} G_{pr} H} R(s) + \frac{G_{pr}}{1 + G_c G_{ef} G_{pr} H} W(s) \qquad (4)$$

Fazendo $G_c\, G_{ef} G_{pr} = G$ chega-se a Eq. (5):

$$Y(s) = \frac{G}{1 + GH} R(s) + \frac{G_{pr}}{1 + GH} W(s) \qquad (5)$$

A equação que se obtém igualando o termo $1 + GH$ a zero, é denominada "*equação característica do sistema de controle*".

A estabilidade de um sistema de controle do tipo descrito acima, depende somente das raízes da equação característica da função de transferência de malha aberta.

A análise deste problema considerará um degrau aplicado na entrada R do sistema e não levará em conta a aplicação de uma perturbação W. Sendo assim, a Eq. (5) possuirá somente o primeiro termo do lado direito, sendo o segundo nulo.

CONSTANTES DE TEMPO DO SISTEMA, DO ELEMENTO SENSOR E DO RETARDO POR TRANSPORTE

A avaliação das constantes de tempo do processo, do elemento sensor e do retardo por transporte são funções das curvas de regime transitório destes sistemas. A constante de tempo de um elemento é definida como sendo o tempo que um elemento leva para chegar a 63.2% da sua resposta final no regime estacionário. Sendo assim, a forma destas funções no tempo é de uma amplitude multiplicada por $1 - e^{-\tau/t}$. Quando $t = \tau$, a exponencial fica igual a 0.368 e o resultado igual a 0.632 da amplitude total, explicando o valor de 63.2%. O retardo por transporte é um fenômeno que ocorre devido a inércia que todos sistemas físicos possuem, caracteriza-se pelo tempo que o sistema leva para começar a reagir a uma variação na sua entrada e pode ser minimizado através de uma melhor disposição dos elementos do sistema. Graficamente o retardo pode ser obtido pela verificação do tempo necessário para que a saída (no caso a temperatura do banho) comece a responder ao sinal de entrada. As figuras que se seguem, mostram as curvas obtidas para o processo e para o elemento sensor nesta ordem e τ e τ_m representam a constante de tempo do processo e o tempo de retardo respectivamente.

O gráfico da performance do processo (Fig. 2) é obtido através da evolução da temperatura do banho, desde a temperatura inicial do sistema (25°C) até o valor final (no caso 63.2°C). O objetivo principal do controle é manter a temperatura do banho em 60°C. Desta forma, o sensor de temperatura é colocando dentro do banho.

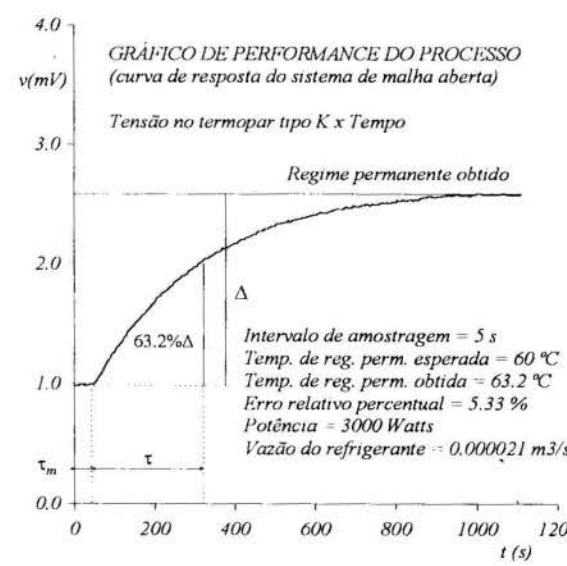


Figura 2 - Gráfico da evolução do processo até o estado estacionário

A Fig. 3 mostra o gráfico da evolução da milivoltagem gerada pelo termopar tipo K com o tempo, em função de um degrau de temperatura aplicado. Inicialmente à temperatura ambiente, o termopar é mergulhado dentro do banho à uma temperatura qualquer, uma vez que a constante de tempo independe do degrau de temperatura aplicado, dependendo apenas das características físicas do sensor.

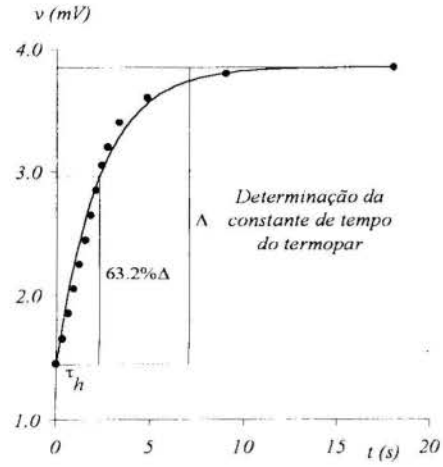


Figura 3 - Curva de resposta transitória do termopar tipo K

Os valores das constantes de tempo foram obtidos experimentalmente, por meio da análise dos gráficos de performance do processo e do elemento sensor ambos em função do tempo. Os valores obtidos então foram os seguintes:

para o processo: $\tau = 319.5$ s
para o retardo: $\tau_m = 19.5$ s
para o sensor: $\tau_h = 2.1$ s

O valor de τ_m é obtido da Fig. 2 medindo o tempo em que o sistema começa a reagir à potência fornecida pela resistência do trocador de calor, é o chamado tempo morto do sistema. Quanto a τ e τ_h são obtidos a partir das considerações feitas no começo desta seção.

DETERMINAÇÃO DO GANHO PROPORCIONAL, TEMPO INTEGRAL E TEMPO DERIVATIVO ATRAVÉS DO AJUSTE DE ZIEGLER-NICHOLS.

O controlador PID possui três parâmetros que devem ser cuidadosamente calculados e ajustados para o perfeito funcionamento do sistema de controle. São eles: o ganho proporcional K_c, o tempo integral τ_i e o tempo derivativo τ_d. Estes parâmetros são calculados através da técnica de ajuste de parâmetros desenvolvida por Ziegler e Nichols em 1942. Para controladores PID esta técnica apresenta as seguintes equações para a determinação dos parâmetros:

$$K_c = 0.6\, K_u \quad (6)$$
$$\tau_i = P_u / 2 \quad (7)$$
$$\tau_d = P_u / 8 \quad (8)$$

Onde K_u é o chamado "*ganho último*" e P_u é o "*período último*" de Ziegler-Nichols. A técnica para a determinação destes parâmetros é a seguinte:

Estipula-se um valor extremamente alto para τ_i e um valor nulo para τ_d. O objetivo é fazer com que o controlador possua somente ação proporcional. A partir daí começa-se com um ganho proporcional pequeno e vai-se aumentando seu valor até que a variável medida (temperatura) comece a oscilar indefinidamente com amplitude e período constantes (Fig.4).

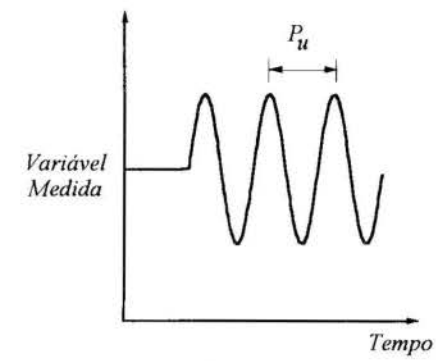


Figura 4 - Período último: P_u

O valor do ganho proporcional para o qual ocorrem estas oscilações é o ganho-limite K_u e o perido de cada oscilação é o período-limite P_u. A partir daí, os parâmetros K_c, τ_i e τ_d são calculados conforme as Eqs. (6), (7) e (8).

Experimentalmente coloca-se o controlador PID com o tempo integral muito alto e o tempo derivativo nulo, garantindo assim, que o controlador fique completamente proporcional ou proporcional puro. Com o sistema de aquisição de dados operando com uma frequência maior que três vezes o tempo morto ($3\tau_m$) para garantir que o sistema sinta as variações de potência e com o ganho variando a partir de um valor médio em torno de 50, levou-se o sistema até a situação de equilíbrio (oscilações com período e amplitudes constantes) e observou-se a forma das oscilações resultantes em torno do ponto de equilíbrio. Caso as oscilações não fossem simétricas dever-se-ia repetir o processo, aumentando-se ou diminuindo-se o ganho. Uma característica interessante deste experimento é que para ganhos abaixo do ganho último K_u, a assimetria é a esquerda e para ganhos acima é a direita. Com base nestas afirmações e repetindo-se os passos, chegou-se aos valores de K_u e P_u, iguais a 95 e 1.8 min respectivamente.

ANÁLISE DA ESTABILIDADE UTILIZANDO A VÁLVULA NO CONTROLE

O sistema de controle projetado foi utilizado no controle de um trocador de calor casco-serpentina, um ambiente isolado termicamente, dentro do qual colocamos um fluído (no caso água) e cuja temperatura do fluído (*variável controlada*) desejamos controlar através de uma resistência elétrica que fornece a potência para aquecimento do sistema e de uma serpentina pela qual passa água de refrigeração para resfriamento do mesmo. A vazão do refrigerante (*variável manipulada*) pode ser variada pelo controlador e a temperatura de *set-point* escolhida por meio de digitação no programa de computador. A figura a seguir procura fornecer uma idéia do sistema.

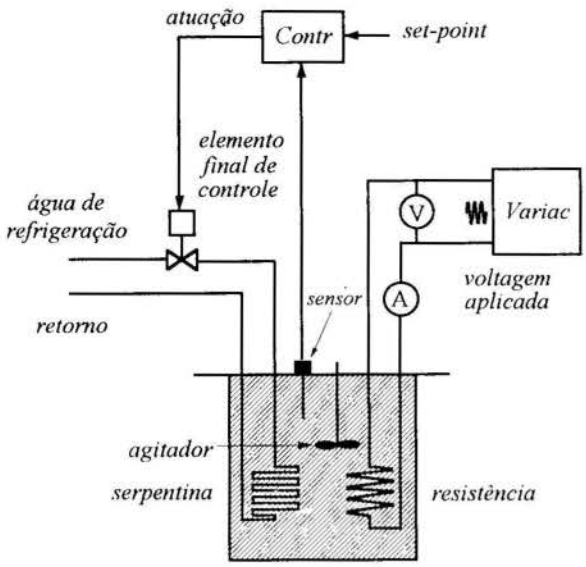


Figura 5 - Representação esquemática do sistema

A análise de estabilidade do sistema, com a válvula como elemento final de controle, pode ser realizada através da equação característica da função de transferência do sistema:

$$1 + GH = 0 \tag{9}$$

sendo para nosso sistema $G = G_c\, G_{ef} G_{pr}$, temos:

$$G = K_c\left[1 + \frac{1}{\tau_i s} + \tau_d s\right] \cdot 1 \cdot R_t \frac{1}{\tau \cdot s + 1} \cdot \frac{-s + 2/\tau_m}{s + 2/\tau_m} \tag{10}$$

onde: $\tau_i = 54$ s, $\tau_d = 13.5$ s,
$\tau = 319.5$ s, $\tau_m = 19.5$ s e
$R_t = 0.0116$ (°C/W)

e o valor de H é dado por:

$$H = \frac{1}{\tau_h s + 1} \tag{11}$$

onde: $\tau_h = 2.1$ s

Na equação (10) anterior, R_t é a resistência térmica do processo, cujo valor de 0.0116 (°C/W) é obtido do projeto do trocador de calor através do Coeficiente Global de Transferência de Calor (U) e da Área de Troca Térmica (A). A equação que relaciona estas duas grandezas é a seguinte:

$$R_t = 1 / (U \cdot A) \tag{12}$$

onde $U = 1036$ W/m^2 °C e $A = 0.083$ m^2.

Desenvolvendo-se a expressão de $1 + G\,H = 0$, chega-se a uma equação cujas raízes são funções do ganho K_c. A equação final fica sendo então:

$$1 + K_c \frac{-8.4564s^3 + 0.2409s^2 + 0.0526s + 0.0012}{10^4 \cdot (3.6231s^4 + 2.1082s^3 + 0.1835s^2 + 0.0006s)} = 0 \tag{13}$$

Como era de se esperar para um problema fisicamente realizável, o grau do numerador é menor do que o grau do denominador, o que está de acordo com as condições expostas em teoria. Reduzindo esta expressão chega-se a seguinte equação característica:

$$3.6231 \cdot 10^4 s^4 + (2.1082 \cdot 10^4 - 8.4564 \cdot K_c)s^3 + \\ + (0.1835 \cdot 10^4 + 0.2409 \cdot K_c)s^2 + (0.0006 \cdot 10^4 + \\ + 0.0526 \cdot K_c)s + 0.0012 \cdot K_c \tag{14}$$

A equação do quarto grau é obtida em função do parâmetro K_c. Ao procurar resolver a equação, verifica-se que todas as raízes da equação também dependem de K_c e como as raízes da equação característica indicam a estabilidade ou não do sistema, esta também depende de K_c. Sabemos que para que um sistema de controle seja estável todas as raízes da equação característica (14) devem possuir parte real negativa e portanto, a análise das raízes dessa equação passa a ser nosso objetivo. Para determinar o comportamento dessas raízes em função do ganho K_c para este sistema, foi feita a análise de estabilidade através do programa MatLab sendo os resultados apresentados na figura a seguir. Verifica-se então, que para o ganho de ajuste do controlador PID utilizado ($0.6\,K_u = 57$) as raízes do polinômio obtido apresentam todas parte real negativa, o que implica na estabilidade do sistema. A figura 5 mostra o "*root-locus*" obtido da Eq.(14).

Nesta figura, uma vez que a função de transferência apresenta quatro pólos, obtemos também quatro ramos que são as trajetórias das raízes da equação característica, começando nos pólos no eixo real para $K_c = 0$ e seguindo para os zeros também no eixo real para $K_c \to \infty$. São eles:

Ramo 1: -0.4762, -j 0.254 e + ∞
Ramo 2: -0.103, +j 0.254 e +0.103
Ramo 3: -0.003 e -0.037
Ramo 4: 0 e -0.037

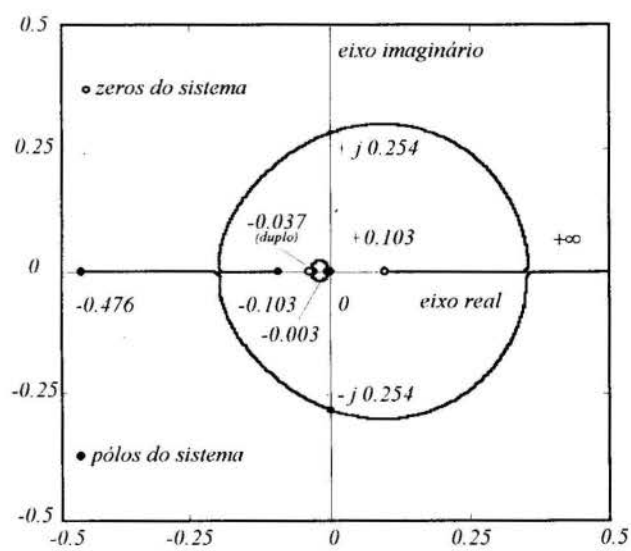


Figura 6 - Lugar da raízes (root-locus) do sistema

No ganho limite $K_c = 2264$, duas raízes estão em $\pm j0.254$. A partir deste limite de estabilidade, estas raízes passam a apresentar parte real positiva e o sistema passa a ser instável.

RESPOSTAS DO SISTEMA

A qualidade do controle realizado pode ser avaliada através das respostas do sistema com o controlador PID e a válvula de controle instalados. Assim, mantendo-se o mesmo *set-point* e a mesma temperatura inicial do fluido dentro do vaso trocador de calor, foram realizados diversos testes para diferentes condições de entrada (potência elétrica fornecida a resistência) e para diferentes intervalos de amostragem, as respostas do controle de dois desses testes indicam o quanto satisfatório foi o controle.

Estes dois exemplos foram obtidos fora das condições iniciais ($T_{banho} = T_{entrada} = 25°C$), para mostrar que uma vez ajustados os parâmetros do controlador, mesmo que o sistema esteja partindo de diferentes condições iniciais (outros níveis de temperatura), o controle se encarrega de levá-lo ao valor desejado.

Como o ganho do sistema está muito longe do ganho limite de estabilidade, não ocorrerão instabilidades associadas à mudanças nas condições iniciais.

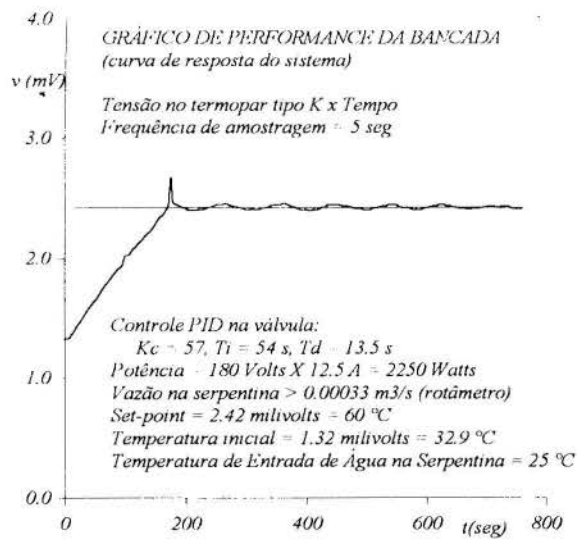


Figura 7 - Resposta do sistema com tempo de amostragem = 5seg

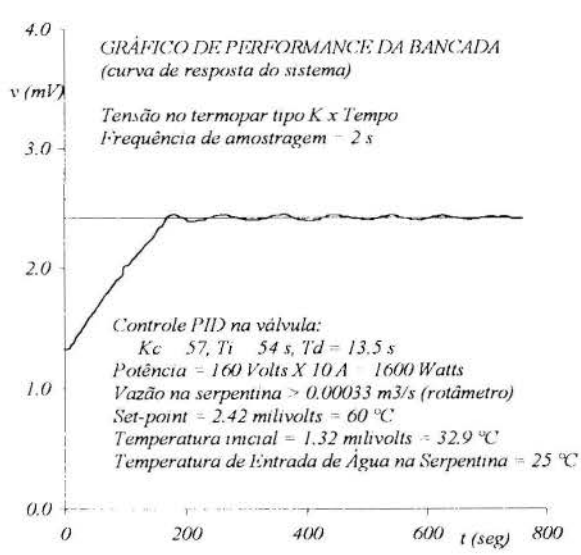


Figura 8 - Resposta do sistema com tempo de amostragem = 2seg

APARATO EXPERIMENTAL

O sistema de controle desenvolvido faz parte de uma bancada didática de controle de temperatura, para fins de análise, síntese e estudo de sistemas de controle. Pode também servir como banho termostato para aferição e calibração de sensores de temperatura, principalmente termopares.

A bancada consiste de um painel frontal onde estão localizadas chaves liga-desliga, dois controladores analógicos (um ON-OFF e outro PID), disjuntores, chaves magnéticas e medidores (termopares e termômetros) que se conectam a um banho termostato-trocador de calor.

Este consiste de um vaso de polipropileno, o qual sustenta um outro vaso de cobre (menor) estando entre estes dois vasos, uma camada de isolamento térmico. O vaso de cobre contém fluido (água) até uma determinada altura, sendo fixado no centro da tampa do vaso, um motor com agitador de forma a homogeneizar a temperatura interna do trocador, eliminando gradientes de temperatura. Envolvendo o agitador encontra-se a serpentina e entre a serpentina e a parede do vaso a resistência. A tampa ainda possui pequenos furos para a inserção de termopares.

O sistema de controle por computador é composto de um conversor A/D e de um micro-computador onde se instala o programa de controle. Através dos dados instantâneos coletados por meio do conversor A/D e de um monitor de vídeo, pode ser vista a evolução do processo através de sua entrada e saída.

A vazão de água do refrigerante é controlada por meio de uma válvula solenóide (ON-OFF) na linha da serpentina e seu controle realizado pelo controlador PID que realiza uma modulação na largura do tempo de abertura ou fechamento da válvula (controle PWM). A potência elétrica entregue a resistência pode ser alterada manualmente através do uso de um Variac.

A bancada pode operar tanto com controladores analógicos quanto através do computador e o controle pode ser feito na válvula ou na serpentina somente pelo ajuste adequado das chaves.

Quando o controle é feito através do computador, os parâmetros do controlador PID são introduzidos no programa, juntamente com o intervalo de amostragem (tempo de aquisição de dados) utilizado que pode ser de 2 em 2 seg, 5 em 5 seg, de acordo com a inércia que o sistema físico venha a apresentar. O número de dados que podem ser coletados também varia podendo ser de 100, 200, 500, etc..

CONCLUSÕES

A utilização de controladores PID no controle de processos oferece uma grande possibilidade na otimização e automatização de sistemas. O uso de controle PID digital exercido através de computador, aprimora ainda mais os benefícios que o controle puramente analógico oferece, como por exemplo a possibilidade de obter parâmetros mais precisos no controle uma vez que em um controlador analógico, na maioria das vezes, não se consegue ajustar os valores exatos destes parâmetros de controle, pois estes são ajustados por meio de potenciômetros ou trim-pots, que não apresentam boa precisão nos seus ajustes.

No desenvolvimento do sistema notou-se que para a obtenção do ajuste ótimo de Ziegler-Nichols, o tempo de amostragem deveria ser igual a três ou mais valores do tempo morto, pois valores inferiores traduziam em respostas imprecisas ou mesmo na impossibilidade de se observar as oscilações características (como as mostradas na figura 4).

O tempo de amostragem mostrou-se também significativo durante a execução do controle: tempos de amostragem grandes tornam a resposta mais demorada e oscilatória baixando a qualidade do controle, enquanto que tempos muito baixos apesar de aumentar a continuidade da informação, estão limitados às características dos elementos finais utilizados.

BIBLIOGRAFIA

Coughanowr, Donald R., 1986, "*Análise e Controle de Processos*", Donald R. Coughanowr, Lowell B. Koppel, traduzido por Carlos Augusto Perlingeiro, Evaristo Chalbaud. Biscaia Jr., Rio de Janeiro, Ed. Guanabara. Tradução de "*Process Systems Analysis and Control*".

Doebelin, E. O., 1962, "*Dinamic Analyses and Feedback Control*", Mc. Graw Hill, New York.

Dorf, Richard C., 1976, "*Modern Control Systems*", Addison -Wesley Publishing Company, Second Printing.

Mollenkamp, Robert A., 1988, "*Controle Automático de Processos*". Tradução de Ricardo José Tozzi, revisão técnica Marcos Antônio Vieira Peluso et.al., São Paulo, EBRAS.

Ogata, Katsuhito, 1982, "Engenharia de Controle Moderno". Tradução de André Fábbio Kohn e José C. T. de Barros Moraes, Editora Prentice/Hall do Brasil.

ABSTRACT

This paper describes the development of a computer PID control system for a didactic bench of temperature control, using a thermostate bath - heat exchanger (tube coil - vessel). This bench is able to make the checking and calibration of temperature sensors, in your useful range (25 to 100°C) , as well as to verify the application of PID controllers in a representative industrial process system.

ABCM

MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS APLICADO A CAMADA LIMITE: UMA ABORDAGEM EDUCACIONAL USANDO O *MATHEMATICA*®.

Rosa, Eugênio S.[1], Scalon, Vicente L.[2], Mazza, Ricardo A.[1]
[1] Departamento de Energia - Faculdade de Engenharia Mecânica - UNICAMP
[2] Faculdade de Engenharia - Campus de Bauru - UNESP

RESUMO

Utilizando-se do Mathematica® foi implementada uma solução numérica de um problema de camada limite laminar bidimensional usando diferenças finitas com objetivos exclusicamente educacionais. A apresentação de forma concisa do algoritmo e de sua solução permite a fácil utilização em cursos avançados de mecânica dos fluidos, permitindo a extensão do seu escopo e abrangência.

INTRODUÇÃO

Tem surgido, nos últimos anos, uma nova geração de softwares que influenciará marcadamente os meios atuais de ensino e pesquisa. Um destes pacotes é o *Mathematica*® que permite a criação de algoritmos através de manipulações numéricas e simbólicas de uma maneira unificada, assim como a geração de gráficos. Informações detalhadas encontram-se em Wolfram (1991).

O presente trabalho pretende desenvolver uma aplicação no ambiente do *Mathematica*® para solução numérica de problemas de camada limite hidrodinâmica. O enfoque é dado ao aspecto ***educacional*** do pacote e aplicado na solução destes problemas. Com as facilidades para implementação e solução de esquemas discretizantes pode-se explorar a natureza física de problemas não similares em camada limite, estabelecer comparações com soluções analíticas e métodos integrais, estudar controle de camadas limites com sucção e injeção de massa e desenvolver projetos de cursos com escopo mais abrangente, isto é, não restritos somente as soluções analíticas e aos métodos integrais.

EQUAÇÕES DA CAMADA LIMITE

O estudo é restrito aos problemas bidimensionais da camada limite hidrodinâmica de escoamentos incompressíveis e laminares. A solução é implementada para o escoamento ao redor de um cilindro de raio R, por se tratar de um caso de grande aplicação técnica e que, conhecidamente, não possui uma solução similar.

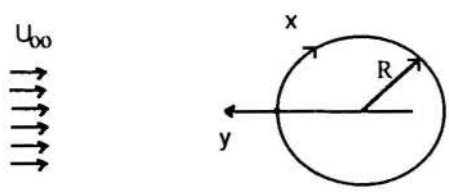


Fig. 1 - Representação esquemática do sistema de coordenadas no cilindro.

A Fig.1 ilustra o sistema de coordenadas utilizado; x e y são, respectivamente, as coordenadas paralelas e transversais a direção do escoamento; u e v são as velocidades nas direções x e y. Destaca-se que a origem das coordenadas é coincidente com o ponto de estagnação frontal do cilindro

Procedendo-se a adimensionalização das variáveis através das Eqs. (1) e (2)

$$x^* = \frac{x}{R},\ y^* = \frac{y}{R}\sqrt{Re_\infty} \qquad (1)$$

$$u^* = \frac{u}{U_\infty},\ v^* = \frac{v}{U_\infty}\sqrt{Re_\infty},\ U^* = \frac{U}{U_\infty},\ P^* = \frac{P}{\rho_\infty U_\infty^2} \qquad (2)$$

chega-se a forma adimensional das equações do momento e massa (White 1991):

$$u^*\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + v^*\frac{\partial u^*}{\partial y^*} = \frac{1}{2}\frac{dU^{*2}}{dx^*} + \frac{\partial^2 u^*}{\partial y^{*2}} \qquad (3)$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial x^*} + \frac{\partial v^*}{\partial y^*} = 0 \qquad (4)$$

onde o superescrito (*) refere-se a variável adimensional, U a velocidade externa a camada limite, U_∞ a velocidade de aproximação ao cilindro e Re_∞ o número de Reynolds definido por $Re_\infty = U_\infty.R/\nu$. As Eqs. (3) e (4) satisfazem as condições de contorno:

$u^*(x^*,0) = 0$ (não deslizamento)
$v^*(x^*,0) = 0$ (sem sucção ou injeção massa)
$u^*(x^*,\infty) = U^*$ (casamento com escoamento externo)

onde a velocidade externa, U^*, é dada através do ajuste experimental obtido por Hiemenz para um cilindro com Re_∞ = 9500 (White, 1991):

$$U^* = 1.814\cdot x^* - 0.271\cdot x^{*3} - 0.0471\cdot x^{*5} \qquad (5)$$

As condições iniciais, ou condições de partida, são aquelas para o escoamento em um ponto de estagnação bidimensional. A obtenção dos perfis u e v é realizada através da solução por similaridade das equações de Falkner-Skan quando o parâmetro m = 1 (White, 1991),

$$F''' + F \cdot F' + \frac{2m}{m+1} \cdot \left(1 - F'^2\right) = 0 \qquad (6)$$

sujeita as condições de contorno:

$$F(0) = 0; \quad F'(0) = 0 \quad e \quad F''(0) = 1.23259 \qquad (7)$$

Os perfis de velocidade são obtidos através da solução de F e de suas derivadas como segue:

$$u(0,y) = U(0) \cdot F'(\eta) \equiv 0$$

$$v(0,y) = -U(0) \cdot \sqrt{\frac{m+1}{Re_x}} \left(F(\eta) + \frac{m-1}{m+1} \eta F'(\eta) \right)$$

onde η é a variável de similaridade,

$$\eta = \frac{y}{x} \sqrt{\frac{(m+1) \cdot Re_x}{2}}$$

Em termos das variáveis adimensionais do problema, os perfis u e v se transformam em:

$$u^*(0,y^*) = 0 \qquad (8)$$

$$v^*(0,y^*) = -\sqrt{1.814} \cdot F\left[y^* \sqrt{1.814}\right] \qquad (9)$$

ESQUEMA DE DISCRETIZAÇÃO

Há na literatura uma variedade de esquemas discretizantes para o sistema parabólico de equações em x, definido pelas Eqs. (3) e (4). Talvez os três esquemas mais populares são: o método de "box" desenvolvido por Keller e implementado por Cebeci e Bradshaw (1977), o método de Crank-Nicolson implementado para solução em camada limite por Blotner (1970) e o método de volumes finitos desenvolvido por Patankar e Spalding (1970). Estes trabalhos utilizam, para melhorar a eficiência dos cálculos, transformações de variáveis utilizando a função corrente, similaridade local com as variáveis de Falkner-Skan, etc. Em geral estes tipos de transformações tendem a obscurecer o que ocorre durante o desenvolvimento do algoritmo.

O objetivo deste trabalho não é, a comparação entre os métodos existentes ou o desenvolvimento de um novo método numérico, mas sim, enfatizar o caráter educacional da implementação destas técnicas. Para tanto propõe-se um esquema discretizante utilizando as formas mais simples de diferenças finitas com as variáveis primitivas x, y e u, v, conforme sugerido por White (1991).

A malha adotada é uniformemente espaçada nas direções x e y com variações Δx e Δy, respectivamente. As colunas e linhas são denotadas pelos índices i e j sendo que a origem está em (i,j) = (0,0). O domínio computacional é mostrado na Fig. 2.

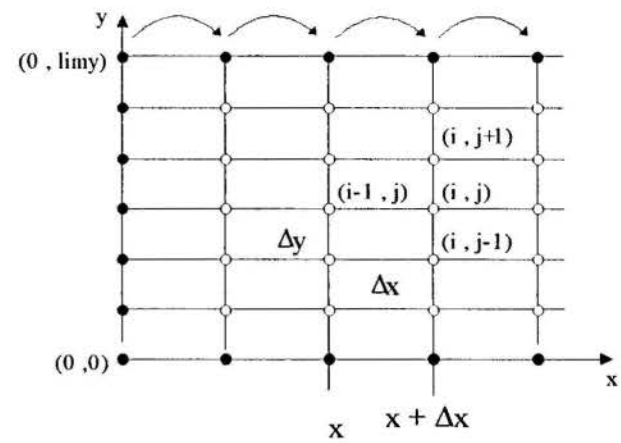


Fig.2 - Malha computacional para um esquema de diferenças finitas aplicada a camada limite bidimensional.

O esquema discretizante utilizado é implícito na velocidade u com uma aproximação de segunda ordem para y e de primeira ordem para x. A Eq. (3) discretizada é escrita por:

$$u^*_{i-1,j} \frac{u^*_{i,j} - u^*_{i-1,j}}{\Delta x^*} + v^*_{i-1,j} \frac{u^*_{i-1,j+1} - u^*_{i-1,j-1}}{2\Delta y^*} = \frac{1}{2} \frac{U_i^{*2} - U_{i-1}^{*2}}{\Delta x^*} + \frac{u^*_{i,j-1} - 2 \cdot u^*_{i,j} + u^*_{i,j+1}}{\Delta y^{*2}} \qquad (10)$$

A velocidade v para o nó (i,j) é obtida através da Eq. (4) usando uma média do valor discreto de $\partial u/\partial x$:

$$v^*_{i,j} = v^*_{i,j-1} - \frac{\Delta y^*}{2 \cdot \Delta x^*} \left(u^*_{i,j} - u^*_{i-1,j} + u^*_{i,j-1} - u^*_{i-1,j-1} \right) \qquad (11)$$

O campo de velocidades u no nível (i) é obtido através da solução simultânea do sistema de equações definido pela Eq. (10). Assim é estabelecido um procedimento de marcha ao longo da direção x resolvendo-se, coluna a coluna, o domínio computacional conforme sugerido na Fig. 2. Uma vez determinado o campo de velocidades u no nível (i), o campo de velocidades v é calculado através da Eq. (11). Na malha computacional, Fig. 2, os nós: (i,limy) referem-se as condições do escoamento externo, (0,j) às condições iniciais e, (i,0) às condições de contorno de fronteira sólida. Maiores detalhes sobre o esquema discretizante podem ser encontrados em White (1991).

IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA NO MATHEMATICA®

O objetivo desta seção é mostrar a forma de implementação do algoritmo no ambiente do Mathematica®.

É recomendável que, na primeira linha de programação se limpe da memória todas as variáveis que serão utilizadas e, no caso de se utilizar alguma matriz para armazenamento de dados, defini-la como nula. Isto é feito nas linhas de programação:

In[1]:=

```
Remove["Global`*"];
espmom={};
espdes={};
cf     ={};
```

Como no *Mathematica*® é possível realizar cálculo simbólico, está sendo desenvolvido um procedimento que permite obter equações discretizadas a partir de sua forma diferencial. Ele é baseado em funções de forma de elementos finitos que permite a derivação automática dos coeficientes da diferença finita correspondentes a uma especificada derivada parcial (Mikhailov, 1994). A obtenção das Eqs. (10) e (11) é feita utilizando-se de um pacote feito no próprio *Mathematica*®:

■ Dicretizações das Eqs. a Serem Utilizadas

In[5]:=

```
<<Unicamp`Discret` (*Carrega o Pacote*)
```

■ Eq. da Conservação de Quantidade de Movimento

In[6]:=

```
eqMovi = Primitiva[u,x,-1]*
                DerivDiscrPrim[u,x,dx,1] +
                        Primitiva[v,x,-1]*
                DerivDiscrPrim[u,y,dy,2] +
                         gradPress[x,dx] -
                DerivDiscrSeg[u,y,dy] == 0
```

Out[6]:=

$$\text{grad Press}[x,dx] + \frac{u[-1+i,j](-u[-1+i,j]+u[i,j])}{dx} - \frac{u[i,-1+j]-2u[i,j]+u[i,1+j]}{dy^2} + \frac{(-u[-1+i,-1+j]+u[-1+i,j+1])v[-1+i,j]}{2dy} == 0$$

■ Eq. da Conservação da Massa

In[7]:=

```
eqMassa[j_] = v[j-1] - (0.5*dy)*
                (DerivDiscrPrim[u,x,dx,1] +
   (DerivDiscrPrim[u,x,dx,1]/.j -> j-1))
```

Out[6]:=

$$-0.5dy(\frac{-u[-1+i,-1+j]+u[i,-1+j]}{dx} + \frac{-u[-1+i,j]+u[i,j]}{dx}) + v[-1+j]$$

O sistema de equações é montado declarando-se as variáveis e montando-se uma tabela das equações na forma discreta.

■ Definição da Grade e do Sistema de Equações Discretas

In[9]:=

```
dx   = 0.2*N[Degree];(*passo em x rad*)
dy   = 0.1;          (*passo em y*)
limy= 40;            (*N. nós grade y*)
i    = 1;
variaveis = Table[u[i,j],{j,1,limy-1}];
eqDiscret = Flatten[Table[eqMovi /.
          v[0,j] -> v[j],{j,1,limy-1}]];
```

O *Mathematica*® permite a programação funcional, ou seja, pode-se uma definir funções que, quando alimentadas com um argumento, estas retornam o seu valor. Graças a esta habilidade ficou extremamente simples calcular o gradiente de pressão, bastando definir a função para o perfil de velocidade de Hiemenz, Eq. (5), o qual foi feito da seguinte forma:

■ Perfil Externo de Velocidades - Hiemenz & Gradiente de Pressões

In[15]:=

```
Uo[x_] = 1.814*x-0.271*x^3-0.0471*x^5;
gradPress[x_,dx_] = -(1/2)*(Uo[x]^2 -
                        Uo[x-dx]^2)/dx;
```

As condições de contorno são introduzidas de maneira usual:

■ Condicoes de Contorno

In[17]:=

```
u[1,0] = 0;          (*não deslizamento*)
u[1,limy] := Uo[x];(*vel. no infinito*)
v[0] = 0;   (*sem sucção/injeção massa*)
```

As condições iniciais foram obtidas solucionando a Eq. (6), utilizando-se de um pacote para solução de equações diferenciais do próprio *Mathematica*®. Também foi realizada a conversão das velocidades, Eqs. (8) e (9) devido a adimensionalização. O procedimento então ficou :

■ Condições Iniciais - Solução de Falkner-Skan

Campo de velocidade inicial obtido a partir da solução do problema de estagnação 2-D.

In[20]:=

```
Clear[eqFS,solFS]
eqFS = f'''[h] + f''[h]*f[h] + 1 -
                        (f'[h])^2;
solFS=Dsolve[{eqFS==0,f[0]==0,f'[0]==0,
 f''[0]==1.23259},f,{h,0,10}][[1,1,2]];
Do[{u[0,j] = 0, v[j] = -(Sqrt[1.814]*
solFS[Sqrt[1.814]*(j)*dy])},{j,0,limy}]
```

O sistema é solucionado calculando as velocidades *u* e *v* a cada passo *dx*. Com o perfil de u a tensão, *tau*, na parede é determinada por uma diferenciação numérica e armazenada em *cf*. Também para cada variação de 1 grau no cilindro é determinada uma função interpolante do perfil de velocidades u, *fe*, para cálculo da espessura de deslocamento e momento, deltas e teta. Estas grandezas são armazenadas, respectivamente, nas variáveis *espdes* e *espmom*. Finalmente, os perfis de velocidade u e v são gravados em *Uperfil* e *Vperfil* a cada 10 graus. O procedimento de cálculo avança em *x* com passo *dx* até o ponto onde ocorre o descolamento, ou seja, quando *tau* < 0.

■ Resolução do Sistema

In[24]:=

```
k  = 1;
tau = 1;
While[ tau>0
{ x = dx*k;
  ang = x/N[Degree];
  solução = Solve[eqDiscret,variaveis];
  Do[u[1,j] = solução[[1,j,2]],
                        {j,1,limy-1}];
  Do[v[j]   = eqMassa[j],{j,1,limy}];
```

```
Do[u[0,j] = u[1,j],{j,1,limy}];
Do[u[1,j] = .,{j,1,limy-1}];
Clear[sx,fe];
tau = (1/(12*dy))(48*u[0,1] -
              36*u[0,2] + 16*u[0,3] -
                              3 *u[0,4]);
AppendTo[cf,{ang,tau}];
If[ Chop[Mod[ang,1]] == 0.,
     { fe = Interpolation[Table[
        {(j)*dy,N[u[0,j]/u[0,limy]]},
                        {j,0,limy}]];
      deltas = NIntegrate[(1-fe[y]),
              {y,0,(limy-1)*dy}];
      theta = NIntegrate[fe[y]*(1 -
         fe[y]),{y,0,(limy - 1)*dy}];
      AppendTo[espdes,{ang,deltas}];
      AppendTo[espmom,{ang,theta}];
      If[ Chop[Mod[ang,10.]] == 0.,
          {Vperfil[ang] =
    Table[{(j)*dy,v[j]}, {j,0,limy}];
           Uperfil[ang] =
  Table[{(j)*dy,u[0,j]},{j,0,limy}]}];
}];k++}]
```

Após calcular todas as grandezas de interesse, estas são gravadas em arquivos, para posterior análise. Entretanto, antes de gravar é importante apagá-los do disco pois, caso isto não seja feito, haverá um sobreposição de dados aumentando significativamente o tamanho dos arquivos.

■ Saída de Dados

In[27]:=

```
DeleteFile["saida1.m"]
DeleteFile["saida2.m"]
DeleteFile["saida3.m"]
Save["saida1.m",espdes,espmom,cf]
Save["saida2.m",Vperfil]
Save["saida3.m",Uperfil]
```

O ponto de descolamento ocorre quando cf = 0.

■ Cálculo do Ponto de Descolamento

In[33]:=

```
Clear[descol,sol]
descol = Interpolation[cf];
sol = FindRoot[descol[dummy] == 0,
  {dummy,{75,ang}}];
Print["Ponto de Descolamento = ",
    N[sol[[1,2]],3]," graus"]
```

Ponto de Descolamento = 80.4 graus

Foi adicionado ao final do programa uma saída gráfica pois, desta forma, fica mais agradável e rápido a visualização dos resultados. Aqui, além de utilizar a habilidade gráfica do *Mathematica*®, utiliza-se novamente a programação funcional, ou seja, definem-se funções para a geração dos gráficos.

■ Saída Gráfica

In[37]:=

```
Clear[graf1,graf2,graf3,majorticks,Cf,
      theta,delta]
CF = Graphics[Text[FontForm["Cf*",
              {"Times",14}],{68,1.75}],
         DisplayFunction -> Identity] ;
theta = Graphics[Text[FontForm["q",
              {"Symbol",18}], {82,0.5}],
         DisplayFunction -> Identity];
delta = Graphics[Text[FontForm["d",
              {"Symbol",18}],{82,1.5}],
         DisplayFunction -> Identity];
majorticks[min_,max_,step_] :=
      Range[Floor[min],Floor[max],step]
graf1[n_] := ListPlot[n,PlotJoined ->
    True, DisplayFunction - > Identity,
    AxesOrigin -> {0,0}, Frame -> True,
          PlotRange -> {{0,90},{0,2}},
    FrameTicks -> {majorticks[0,90,10],
     majorticks[0,2,0.5]}, GridLines ->
                {majorticks[0,90,10],
               majorticks[0,2,0.25]},
       FrameLabel -> {"x (graus)",""}];
graf2[n_] := ListPlot[n,PlotJoined ->
     True, DisplayFunction -> Identity,
       AxesOrigin->{0,0},Frame -> True,
             PlotRange->{{0,4},{0,2}},
    FrameTicks -> {majorticks[0,4,0.5],
                 majorticks[0,2,0.5]},
    GridLines -> {majorticks[0,4,0.25],
               majorticks[0,2,0.25]},
FrameLabel -> {"y.Re^0.5/R","u/Uinf"}];
graf3[n_] := ListPlot[n,PlotJoined ->
     True, DisplayFunction -> Identity,
      AxesOrigin->{0,0}, Frame -> True,
            PlotRange->{{0,4},{-3,3}},
      FrameTicks->{majorticks[0,4,0.5],
               majorticks[-3,3,1.0]},
      GridLines->{majorticks[0,4,0.25],
   majorticks[-3,3,0.5]}, FrameLabel ->
     {"y.Re^0.5/R","v.(Re)^0.5/Uinf"}];
```

O coeficiente de atrito Cf*,espessura de deslocamento δ* e espessura de momento θ*, em função da posição angular são plotados abaixo, onde Cf*, δ* e θ* estão definidos pelas equações abaixo:

$$C_f^* = \left(\sqrt{Re_\infty}/R\right)\cdot \tau_w \Big/ 0.5\cdot\rho\cdot U_\infty^2$$

$$\delta^* = \left(\sqrt{Re_\infty}/R\right)\cdot \int (1 - u/U)\cdot dy$$

$$\theta^* = \left(\sqrt{Re_\infty}/R\right)\cdot \int u/U\cdot(1 - u/U)\cdot dy$$

Os resultados numéricos do coeficiente de atrito, C*f, da espessura de deslocamento, δ* e da espessura de momento, θ*, são mostrados na Fig. 3.

In[45]:=

```
Show[graf1[cf],CF,graf1[espdes],delta,
     theta,graf1[espmom],DefaultFont ->
     {"Times",14},DisplayFunction ->
      $DisplayFunction];
```

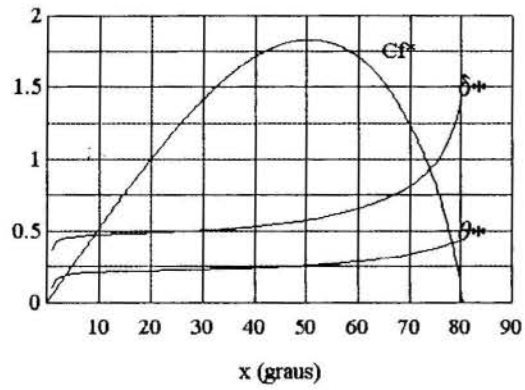


Fig. 3 - Coeficiente de atrito, espessura de deslocamento e espessura de momento em função da posição angular

Os perfis de velocidade u/U_∞ em função da distância $y\cdot\left(\sqrt{Re_\infty}/R\right)$ para as posições angulares de 10° em 10° até 80° resultantes são mostrados na Fig. 4.

In[46]:=

```
Show[graf2[Uperfil[10.]],
                    graf2[Uperfil[20.]],
                    graf2[Uperfil[30.]],
                    graf2[Uperfil[40.]],
                    graf2[Uperfil[50.]],
                    graf2[Uperfil[60.]],
                    graf2[Uperfil[70.]],
                    graf2[Uperfil[80.]],
          DefaultFont -> {"Times",14},
     DisplayFunction->$DisplayFunction];
```

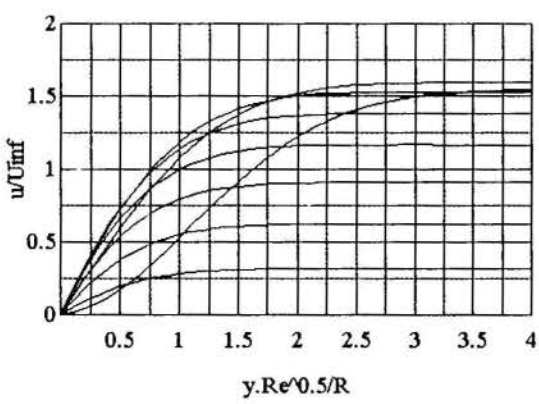


Fig. 4- Perfil de velocidade u/U∞ em função da distância da parede para posições angulares espaçadas de 10 em 10 graus até 80 graus.

De forma análoga, os perfis de velocidade $v\cdot\left(\sqrt{Re_\infty}/U_\infty\right)$ em função da distância $y\cdot\left(\sqrt{Re_\infty}/R\right)$ para posições angulares de 10° em 10° até 80° são mostrados na Fig. 5.

In[47]:=

```
Show[graf3[Vperfil[10.]],
                    graf3[Vperfil[20.]],
                    graf3[Vperfil[30.]],
                    graf3[Vperfil[40.]],
                    graf3[Vperfil[50.]],
                    graf3[Vperfil[60.]],
                    graf3[Vperfil[70.]],
                    graf3[Vperfil[80.]],
          DefaultFont -> {"Times",14},
     DisplayFunction->$DisplayFunction];
```

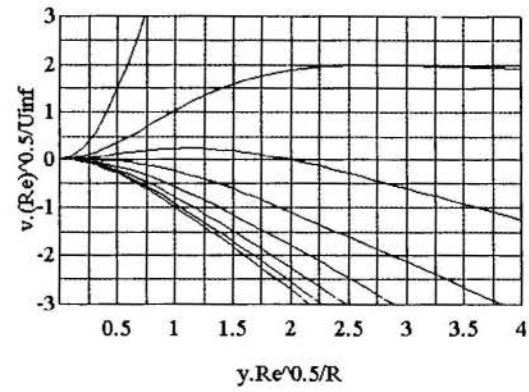


Fig. 5 - Perfil de velocidade $v\cdot\left(\sqrt{Re_\infty}/U_\infty\right)$ em função da distância da parede para posições angulares espaçadas de 10 em 10 graus até 80 graus.

CONCLUSÕES

Este procedimento avalia com precisão os principais parâmetros que caracterizam a camada limite. O ponto de descolamento é previsto em 80,4° enquanto que o valor experimental é de aproximadamente 80,5°. Os valores de Cf*, δ*, e * encontram-se em concordância com os valores publicados em Schlichting (1960), enquanto que os valores dos perfis de velocidades são os mesmos de White (1991). O procedimento permite ainda que, com uma simples mudança nas condições de contorno, possa se estudar a camada limite com sucção ou injeção. Escoamentos em outros corpos podem também ser determinados bastando para tanto que se substitua o perfil de velocidades externo por um adequado. Além disto, a simplicidade na obtenção das equações discretizadas facilita a exploração novos esquemas discretizantes.

REFERÊNCIAS

Blotner, F.G.,1970, "Finite Difference Methods of Solution of the Boundary Layer Equations", *AIAA J.*, Vol.8, pp. 193-205.

Cebeci, T., and Bradshaw, P.,1977, "*Momentum Transfer in Boundary Layers*", McGraw Hill.

Mikhailov,M.D, 1994, "Finite Difference Method by Using Mathematica", *Int. J. Heat Mass Transf.*, Vol.37, pp.375-379.

Patankar,S.V and Spalding, D.B.,1970, "*Heat and Mass Transfer in Boundary Layers*", 2nd ed., Intertext, London.

Schilichting, H., 1960, "*Boundary Layer Theory*", McGraw Hill.

White,F.M., 1991, "*Viscous Fluid Flow*", 2nd ed., McGraw Hill.

Wolfram,S., 1991, "*Mathematica, A Sytem for Doing Mathematic by Computer*", 2nd ed., Addison Wesley.

SUMMARY

A finite difference scheme is implemented in Mathematica® to obtain the solution of the two dimensional laminar boundary layer. Aiming toward educational purposes; the paper shows, in a concise form, the algorithm implementation and its solution in a way that it can be easily used in graduated curses.

ABCM

INFLUÊNCIA DA ALTURA EFETIVA DA PLUMA EM MODELOS DE ESTIMATIVA DE DISPERSÃO DE POLUENTES

Márcio Dimas Ramos, Genésio José Menon, Rogério José da Silva
Escola Federal de Engenharia de Itajubá
Av. BPS, 1303, Cx. Postal 050
Cep. 37500-000 - Itajubá - MG

RESUMO

Este trabalho apresenta resultados de comparação entre modelos de dispersão de poluentes na atmosfera, emitidos por fornos rotativos da indústria cimenteira. Quando da queima de resíduos industriais perigosos ou resíduos urbanos como combustíveis alternativos, é necessário se ter uma estimativa da concentração desses produtos em regiões próximas de uma instalação emissora, de maneira a se estabelecer a máxima exposição individual (MEI), sem que ocorra danos à saúde das pessoas que vivem nesta região. Como existem diferentes modelos de dispersão, aqui será dado ênfase nas diferentes maneiras de se calcular a altura efetiva da pluma, a qual é um dos parâmetros necessários para o cálculo desta estimativa.

INTRODUÇÃO

O co-processamento de resíduos industriais nos fornos rotativos da indústria de cimento vem surgindo como uma tecnologia de ponta no tratamento de determinados tipos de resíduos industriais. O processo consiste basicamente na substituição de uma parcela do combustível tradicional (carvão mineral, óleo combustível ou gás natural) por um resíduo industrial com características dentro de padrões pré-estabelecidos, por questões operacionais e ambientais. Desta forma, ocorre, por um lado, uma economia de recursos energéticos e, por outro lado, um tratamento e disposição final de resíduos perigosos (Ramos et. al, 1995).

As vantagens que o co-processamento em fornos da indústria cimenteira (Figura 1) apresenta sobre a incineração convencional (Figura 2) são expressivas, devido às características operacionais dos fornos rotativos de cimenteiras, os quais apresentam altas temperaturas de chama (≈ 2000 °C) durante a operação normal, maior tempo de residência em alta temperatura e de mistura, garantindo-se desta forma uma maior eficiência na destruição térmica. Somam-se a isso as características alcalinas da matéria-prima (neutralização do ácido clorídrico ou outros compostos ácidos), a incorporação das cinzas ao clínquer (o que promove a imobilização de metais pesados, por exemplo) e a redução de outros custos (Silva et al., 1994).

No caso do incinerador, é necessário realizar a queima de um combustível para se fazer a incineração de resíduos, enquanto no co-processamento o poder calorífico do resíduo é aproveitado no processo. A relação comprimento/diâmetro dos fornos rotativos, é de aproximadamente 4 para o incinerador e de 14 a 16 para o forno rotativo de fábrica de cimento. Com isto, temos uma diferença no tempo de permanência dos gases nos fornos, sendo este tempo menor nos incineradores, fator que influencia diretamente na eficiência de destruição térmica dos resíduos. Além disso, para se fazer o tratamento dos gases nos incineradores, é necessários a introdução de reagentes para neutralizar compostos oriundos da queima dos resíduos, ao passo que, no co-processamento, estes reagentes já se encontram na forma de matérias-primas utilizada no processo.

Embora seja extremamente adequado e com custos bastante inferiores à incineração convencional, o co-processamento de resíduos não deve ser utilizado indiscriminadamente, pois muitos tipos de resíduos não se prestam à queima por este processo, por razões que serão analisadas posteriormente, onde se discutirão os problemas de formação e controle de emissões de poluentes nas fábricas de cimento.

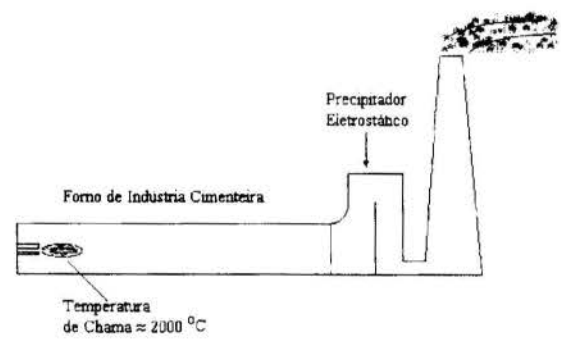


Figura 1 - Forno Longo - Via Seca

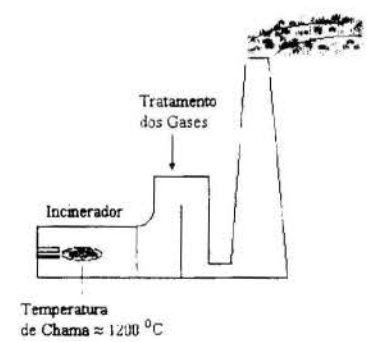


Figura 2 - Incinerador

A viabilização quanto à destruição térmica de um determinado resíduo deve ser feita caso a caso, sendo necessário avaliar as características físico-químicas dos mesmos e sua compatibilidade com o processo de clinquerização, observadas as limitações ambientais relativas às emissões atmosféricas, à segurança e risco quanto a manuseio, acondicionamento e transporte dos resíduos, além do fato de que parte deles fica incorporada ao clínquer.

LIMITES DE EMISSÕES PARA METAIS PESADOS, PRODUTOS DE COMBUSTÃO INCOMPLETA E ÁCIDO CLORÍDRICO

As emissões de metais pesados para a atmosfera devem obedecer padrões estabelecidos para uma Máxima Exposição Individual (MEI), que é definida como uma exposição em alta concentração para uma pessoa, durante 24 hs por dia, 365 dias por ano, numa vida estimada de 70 anos. Nos Estados Unidos, a Legislação para Caldeiras e Fornalhas Industriais (USEPA - BIF), que tem se tornado padrão de referência para o controle das emissões decorrentes do co-processamento de resíduos industriais, define os limites máximos para a MEI, conforme apresentado na Tabela 1 (Holcomb and Pedelty, 1992).

Tabela 1 - Limites Máximos de Emissões Segundo a USEPA para a Máxima Exposição Individual.

Substância	Limites [$\mu g/m^3$]	Substância	Limites [$\mu g/m^3$]
Antimônio	0,30	Cromo Hex.	0,00083
Arsênio	0,0023	Chumbo	0,09
Bário	50,0	Mercúrio	0,08
Berílio	0,0042	prata	3,0
Cádmio	0.0056	Tálio	0,50
PRODUTOS DE COMBUSTÃO IMCOMPLETA - 2,3,7,8 - TCDD (Tetraclorodibenzo-p-dioxina) equivalente -0,00000022$\mu g/m^3$			
PRODUTOS ORGÂNICOS PERIGOSOS - Eficiência de Destruição e Remoção - 99.99%			

Fonte: Holcomb and Pedelty (1992)

Com a queima de produtos clorados existe a necessidade de controle, também das emissões de ácido clorídrico (HCl) que passam a ocorrer, além das possíveis emissões de outros compostos clorados, decorrentes da combustão incompleta. Os limites estabelecidos na Legislação Americana diferem de um Estado para outro, bem como entre diferentes países (Ramos, et. al, 1995).

LIMITES DE UTILIZAÇÃO DE COMBUSTÍVEIS SECUNDÁRIOS

Pelas caraterísticas de operação em alta temperatura, os fornos rotativos da indústria de cimento podem ser considerados como incineradores versáteis, podendo queimar combustíveis no estado sólido, líquido ou gasoso. Podem ainda queimar uma variada gama de resíduos industriais e urbanos, em condições específicas. Uma relação de combustíveis (convencionais e alternativos) é apresentada na Figura 3.

As altas temperaturas de chama, bem como o maior tempo de permanência dos gases nestas, asseguram eficiências de destruição e remoção (DRE) de compostos perigosos, acima de 99,99%. Entretanto, devido ao grande volume de gases gerados na combustão e nas reações de calcinação e clinquerização, e emitidos pelas chaminés destas instalações, existe também, a emissão de produtos de combustão incompleta, produtos orgânicos, organos-clorados e metais pesados, em pequena quantidade, mas que devem ter suas concentrações sujeitas a controle dentro de limites extremamente pequenos. Assim, neste trabalho são evidenciados os estudos de dispersão atmosférica utilizados na estimativa inicial das concentrações destes produtos no ar atmosférico, visando estabelecer de forma primária, se os níveis de poluentes podem ultrapassar concentrações consideradas seguras para a saúde humana e o meio ambiente.

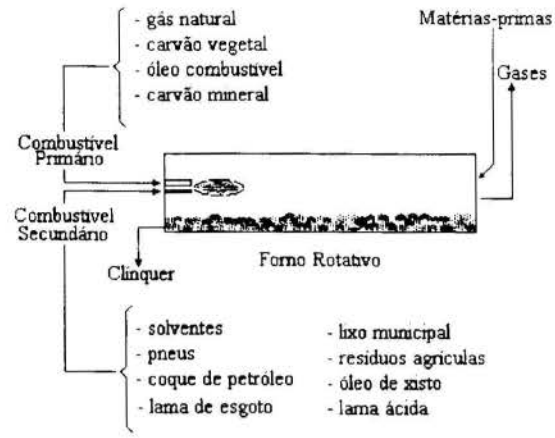


Figura 3 - Relação de Combustíveis Primários e Secundários Utilizados na Fabricação de Clínquer

As concentrações máximas de poluentes na condição de Máxima Exposição Individual tendem a estabelecer, os limites máximos de utilização de resíduos perigosos como combustíveis secundários, limitando desta forma os valores das emissões de diferentes poluentes.

A ESTIMATIVA DA CONCENTRAÇÃO DE POLUENTES

Buscando adequar os níveis máximos de emissões aos limites máximos de concentração de poluentes no ar, principalmente de produtos de combustão incompleta, metais pesados e ácido clorídrico, pode-se, através de modelos de dispersão atmosférica, estimar os níveis de concentração em torno da instalação emissora, visando manter níveis considerados seguros para estes poluentes.

Os poluentes liberados para a atmosfera deslocam-se com o vento, sendo dispersados pelo fluxo de vento turbulento natural. Isto é, a velocidade do vento aumenta em função da distância da superfície ao topo da camada limite planetária e a direção do vento muda lentamente com a altura, embora não muito indicada teoricamente. Nota-se, ainda, que o fluxo de vento também pode ser afetado pelas diferenças de temperatura. Assim, o solo e a brisa do mar podem aumentar a influência sobre a direção de deslocamento do poluente emitido dentro do ar, como também a topografia pode canalizar o fluxo ou mudar a sua direção (Masters, 1991).

Pequenas partículas ou moléculas de gases liberadas dentro da atmosfera são separadas rapidamente uma das outras. O problema de difusão turbulenta na atmosfera não tem sido ainda formulado no sentido de obter um modelo físico básico simples, o qual possa explicar todos os significantes aspectos deste problema. Um modelo bem aceito emtre vários autores é a teoria estatística, já abordada em outros trabalhos (Ramos et al., 1995).

No sistema de coordenadas, como mostra a Figura 4, que é utilizado para fazer cálculos com modelos de dispersão Gaussiana, assume-se que a direção x é a direção de deslocamento da pluma estendida horizontalmente na direção do vento. O eixo y, é no plano horizontal, perpendicular ao eixo x, e o eixo z estende verticalmente. O deslocamento da pluma se dá ao longo ou paralelo ao eixo x (Sax, 1974).

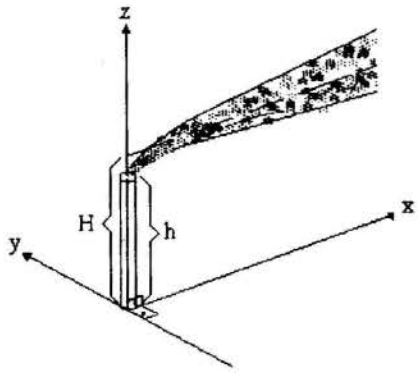


Figura 4 - Sistema de Coordenada e geometria básica da Equação da Pluma Gausiana

A equação que rege a teoria estatística é a seguinte:

$$C(x,y,z;H) = \frac{Q}{2.\pi.\sigma_y.\sigma_z.u} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] .\left\{\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right]\right\} \quad (1)$$

onde **C** é a concentração em alguma coordenada (x,y,z) para uma dada emissão **Q**, cuja saída se dá a uma altura **H**, a qual representa a altura efetiva de elevação da pluma tomada como a soma da altura física da chaminé emissora com altura de elevação da pluma após a saída desta.

As unidades normalmente utilizadas em modelos Gaussianos são: **C** - concentração em [g/m^3]; **Q** - a taxa de emissão em [g/s]; **u** - velocidade do vento em [m/s]; σ_y, σ_z, **H** e todas as coordenadas em [m].

Assim, apresenta-se a seguir os principais parâmetros utilizados no cálculo da estimativa de um valor para a concentração de um determinado poluente em um ponto próximo a uma chaminé, na qual são emitidos vários tipos de poluentes. Baseado na Equação (1), pode-se estimar qual a concentração de poluentes emitidos em um ponto no espaço próximo a uma chaminé.

Sendo os valores de **x**, **y** e **z** conhecidos, pois referem-se às coordenadas do ponto onde se deseja estimar a concentração, devem ser conhecidas, também, a velocidade do vento (**u**), bem como a quantidade (**Q**) de poluente que sai da chaminé.

Os coeficientes de dispersão σ_y e σ_z são funções da distância entre o local onde se estima a concentração e a fonte emissora, eles podem ser encontrados nos gráficos apresentados nas Figuras 5 e 6, respectivamente, desde que se saiba a que distância se deseja estimar a concentração e em que categoria se classificam as condições metereológicas da localidade em questão.

A classificação das condições metereológicas é dada de acordo com a velocidade do vento e outras condições estabelecidas conforme mostrado na Tabela 2.

Para efeito computacional, existem equações que representam as curvas correspondentes aos coeficientes de dispersão horizontal e vertical, apresentadas em outros trabalhos (Ramos at. al, 1995).

Tabela 2 - Classificação das Condições Metereológicas.

Velocidade do Vento	Dia			Noite	
	Radiação Solar			Nebulosidade	
	Forte	Moderado	Fraca	Baixa Nebul.	Nebuloso
< 2	A	A - B	B	-	-
2 - 3	A - B	B	C	E	E
3 - 5	B	B - C	C	D	E
5 - 6	C	C - D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

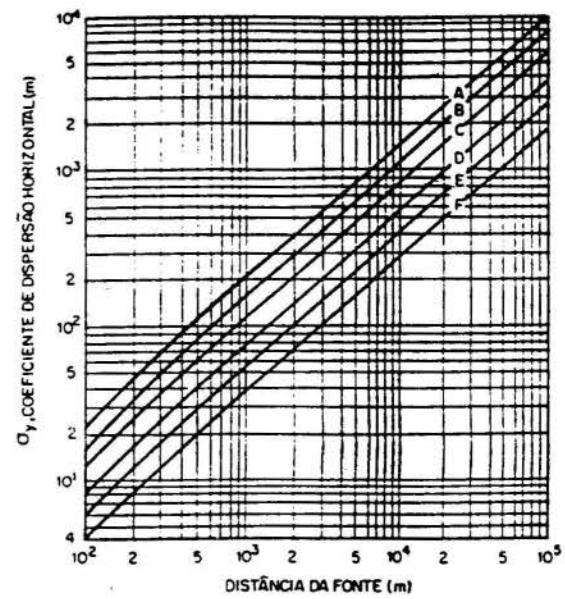


Figura 5 - Coeficiente de dispersão horizontal.

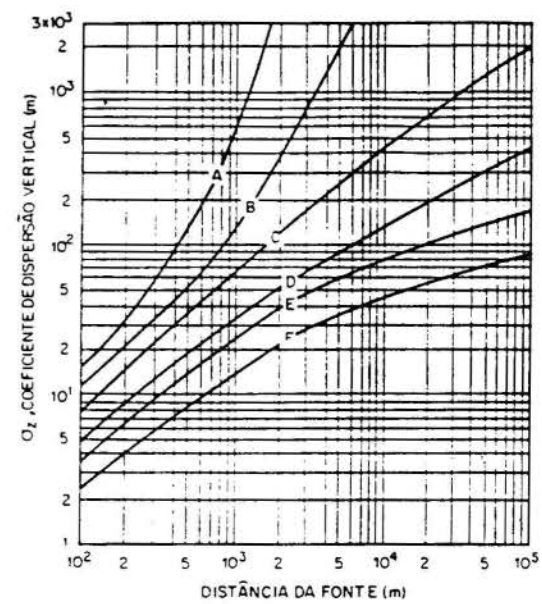


Figura 6 - Coeficiente de dispersão vertical.

Um dos parâmetros, da Equação (1), de bastante relevância que é o valor de (**H**) pode ser calculado conforme Equação (2):

$$H = h + \Delta H \quad (2)$$

onde, **h** é a altura da chaminé, e **ΔH** pode ser calculado segundo equações propostas por alguns autores. Segundo Holland apud Sax(1974), a elevação da pluma após a saída da chaminé, pode ser calculada conforme Equação (3):

$$\Delta H = \frac{v_s.d}{u}\left[1{,}5 + \left(2{,}68 \times 10^{-2}.P.\left(\frac{T_s - T_a}{T_s}\right).d\right)\right] \qquad (3)$$

onde: $\mathbf{v_s}$ é a velocidade de saída da chaminé (m/s); **d** é o diâmetro da chaminé (m); **u** é a velocidade do vento (m/s); **P** é a pressão (kPa); $\mathbf{T_s}$ é a temperatura na saída da chaminé (K); $\mathbf{T_a}$ é a temperatura ambiente (K).

Para a ASME e Briggs (Seinfeld, 1986) os valores de ΔH são calculados com base na Equação (4):

$$\Delta H = \frac{E.x^b}{u^a} \qquad (4)$$

cujos coeficientes encontram-se listados na Tabela 3.

Tabela 3 - Coeficientes Utilizados para o cálculo de ΔH segundo a ASME e Briggs.

Referência	Classe	a	b	E	Condições
ASME (1973)	Neutra e Instável	1	0	$7{,}4.(F.h_s^2)^{1/3}$	
	Estável	1/3	0	$2{,}9.(F/S_1)^{1/3}$	
Briggs (1969, 1971, 1974)	Neutra e Instável	1	2/3	$1{,}6.F^{1/3}$	$F < 55,\ x < 49.F^{5/8}$
		1	0	$21{,}4.F^{3/4}$	$F < 55,\ x \geq 49.F^{5/8}$
		1	2/3	$1{,}6.F^{1/3}$	$F \geq 55,\ x < 119.F^{2/5}$
		1	0	$38{,}7.F^{3/5}$	$F \geq 55,\ x \geq 119.F^{2/5}$
	Estável	1/3	0	$2{,}4.(F/S_2)^{1/3}$	
		0	0	$5.F^{1/4}.S_2^{-3/8}$	
		1	2/3	$1.6.F^{1/3}$	

Nomenclatura da Tabela 3:

d = diâmetro da chaminé, m
F = parâmetro de fluxo, $g.d^2.V_s(T_s-T_a)/4T_s$, $m^4\ sec^{-1}$
g = aceleração da gravidade, 9,807 m sec^{-2}
p = pressão atmosférica, kPa
p_o = 101,3 kPa
$S_1 = (g.\partial\theta/\partial z/T_a)(p/p_o)^{0,29}$, sec^{-2}
$S_2 = (g.\partial\theta/\partial z)/T_a$, sec^{-2}, onde $\partial\theta/\partial z$ é apresentado na Tabela 4.
T_a = temperatura ambiente, K
T_s = temperatura na saída da chaminé, K
$\Delta T = T_s - T_a$
V_s = velocidade de saída da chaminé, m sec^{-2}

Tabela 4 - Relação entre as classes de estabilidade de Pasquil-Gifford e o Gradiente Potencial de temperatura

Classe de Estabilidade	Gradiente Potencial de Temperatura $\partial\theta/\partial z$(°C/100 m)
A (extremamente instável)	< -0,9
B (moderadamente instável)	-0,9 a -0,7
C (levemente instável)	-0,7 a -0,5
D (neutra)	-0,5 a 0,5
E (levemente estável)	0,5 a 2,5
F (moderadamente estável)	> 2,5

De posse de todos esses dados, pode-se estimar qual a concentração de poluentes emitidos num ponto desejado, para determinadas condições operacionais da planta emissora, condições ambientais da região na qual se deseja estimar a concentração.

RESULTADOS

Utilizando a teoria Gaussiana descrita anteriormente, pode-se estimar os valores de concentração de metais pesados para a condição de máxima exposição individual, a partir de valores reais, os quais foram obtidos de medições feitas numa fábrica de cimento, quando da realização de testes de queima de uma mistura de resíduos industriais. Os valores relativos à concentração de poluentes emitidos, medidos na saída da chaminé de um forno rotativo de produção de clínquer, são apresentados na Tabela 5.

Tabela 5 - Emissões de metais pesados em testes de queima de resíduos.

Substância	Concentração de Emissão ($\mu g/m^3$)
Antimônio	1.8
Arsênio	3.1
Bário	7.9
Cádmio	1.32
Cromo Hexavalente	0.56
Chumbo	4.3
Mercúrio	2.7
Prata	2.1

Fonte: Holcomb and Pedelty (1992).

Procurando estimar as concentrações máximas das substâncias - antimônio, arsênio, bário, cádmio, cromo hexavalente, chumbo, mercúrio e prata - para uma instalação com produção de 2.000 toneladas/dia de clínquer, chegou-se aos valores apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 - Resultados da estimativa de dispersão de poluentes, comparados às concentrações definidas para a MEI.

Substância	Concentração ($\mu g/m^3$)				
	MEI	ASME	Briggs	Sax	H & P *
Antimônio	$3{,}0 \times 10^{-1}$	$6{,}8 \times 10^{-6}$	$1{,}6 \times 10^{-5}$	$9{,}0 \times 10^{-4}$	$1{,}9 \times 10^{-6}$
Arsênio	$2{,}3 \times 10^{-3}$	$1{,}2 \times 10^{-5}$	$2{,}8 \times 10^{-5}$	$1{,}5 \times 10^{-3}$	$3{,}2 \times 10^{-6}$
Bário	$5{,}0 \times 10^{1}$	$3{,}0 \times 10^{-5}$	$7{,}2 \times 10^{-5}$	$3{,}9 \times 10^{-3}$	$8{,}4 \times 10^{-6}$
Cádmio	$5{,}6 \times 10^{-3}$	$5{,}0 \times 10^{-6}$	$1{,}2 \times 10^{-5}$	$6{,}6 \times 10^{-4}$	$1{,}4 \times 10^{-6}$
Cr. Hexav.	$8{,}3 \times 10^{-4}$	$2{,}1 \times 10^{-6}$	$5{,}1 \times 10^{-6}$	$2{,}8 \times 10^{-4}$	$0{,}6 \times 10^{-6}$
Chumbo	$9{,}0 \times 10^{-2}$	$1{,}6 \times 10^{-5}$	$3{,}9 \times 10^{-5}$	$2{,}1 \times 10^{-3}$	$4{,}5 \times 10^{-6}$
Mercúrio	$8{,}0 \times 10^{-2}$	$1{,}0 \times 10^{-5}$	$2{,}4 \times 10^{-5}$	$1{,}3 \times 10^{-3}$	$2{,}8 \times 10^{-6}$
Prata	3,0	$7{,}9 \times 10^{-6}$	$1{,}9 \times 10^{-5}$	$1{,}0 \times 10^{-3}$	$2{,}2 \times 10^{-6}$

* H & P - Holcomb and Pedelty (1992).

As condições estabelecidas, nas quais obteve-se os maiores valores de concentração foram: velocidade do vento - 2 (m/s); velocidade do gás na saída da chaminé - 7,07 m/s; altura de chaminé - 50 m; diâmetro da chaminé - 3 m; temperatura ambiente - 25°C; temperatura do gás na saída da chaminé - 100°C; pressão atmosférica local - 1 atm.

Assim, os resultados obtidos referem-se a uma concentração de poluentes a uma distância de 1000 m entre o ponto

selecionado e a chaminé emissora, ao nível do solo, em terreno plano e em linha reta, na mesma direção do vento, nas condições metereológicas que levam a uma pior situação de dispersão.

Nas Figuras 7 e 8, são apresentados os resultados contidos na Tabela 6 na forma de gráficos, para melhor visualização dos mesmos.

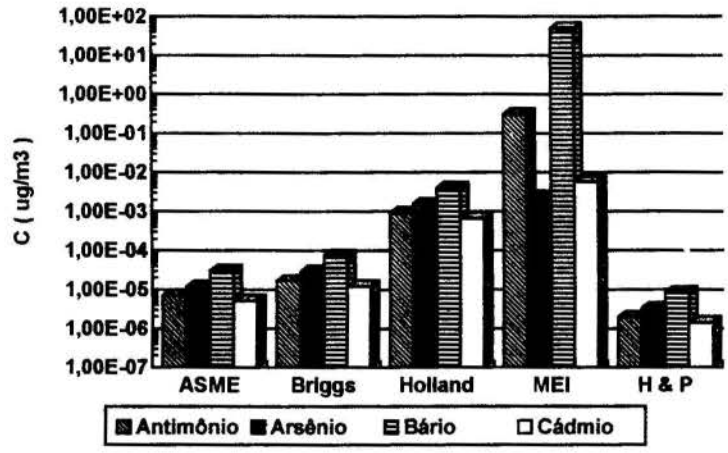


Figura 7 - Resultados da estimativa de concentração atmosférica dos seguintes metais pesados: Antimônio, Arsênio, Bário e Cádmio, para a Classe C - ligeiramente instável, considerando os cálculos de ΔH, comparando-os com os limites para a MEI e valores reais, obtidos por Holcomb & Pedelty (1992)

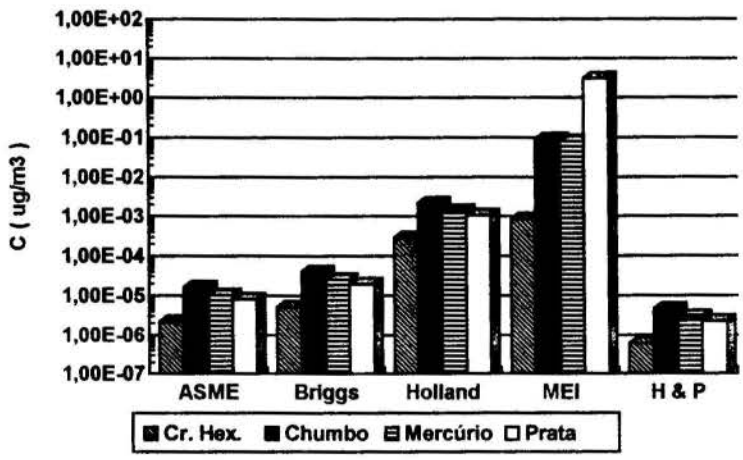


Figura 8 - Resultados da estimativa de concentração atmosférica dos seguintes metais pesados: Cromo Hexavalente, Chumbo, Mercúrio e Prata, para a Classe C - ligeiramente instável, considerando os cálculos de ΔH, comparando-os com os limites para a MEI e valores reais, obtidos por Holcomb & Pedelty (1992)

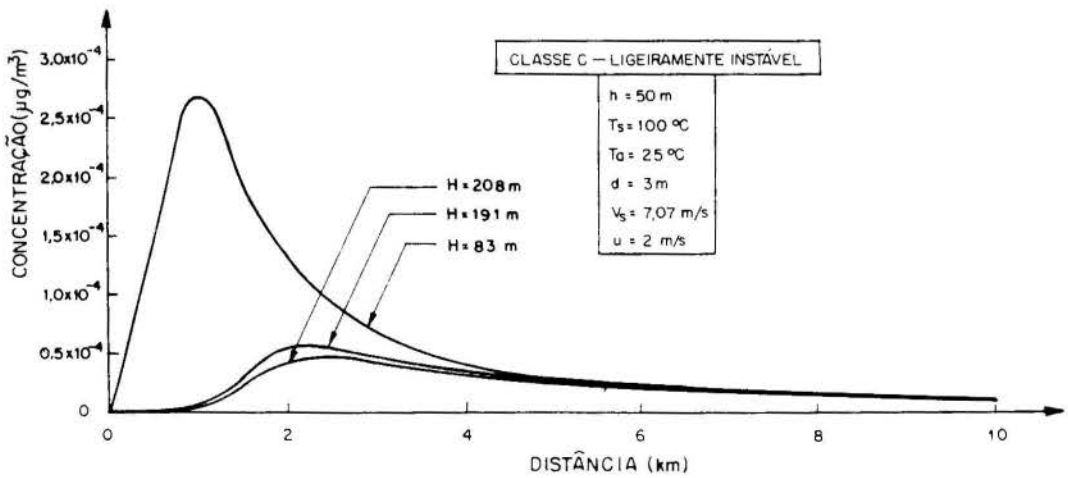


Figura 9 - Dispersão para o Cromo Hexavalente, considerando as diferentes alturas efetivas de elevação da pluma.

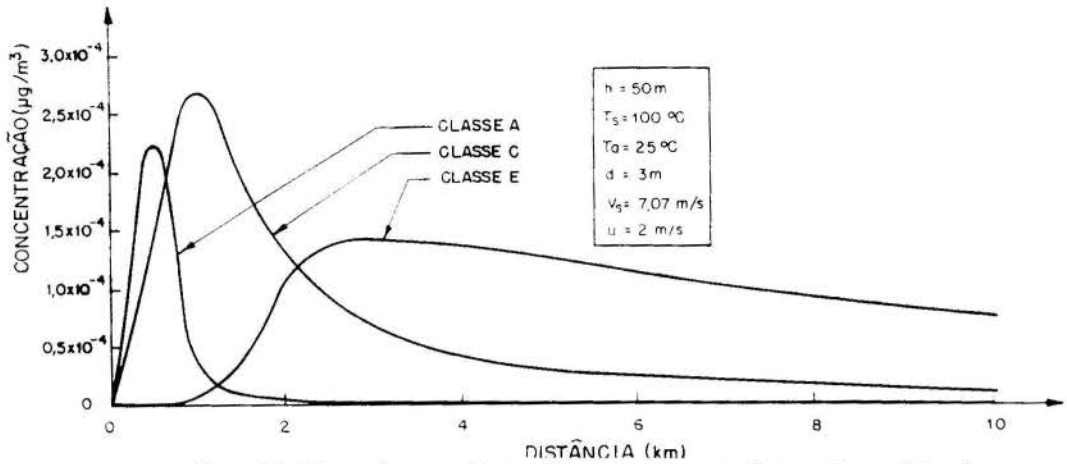


Figura 10 - Dispersão para o Cromo Hexavalente, mantendo-se a altura efetiva de elevação da pluma, e variando-se a classe de estabilidade.

COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES

Comparando-se os limites estabelecidos para a MEI com os resultados do cálculo da estimativa da máxima concentração de metais pesados no ar pelos modelos apresentados, verifica-se que os valores estimados possuem diferentes ordens de grandeza. Isto implica que, na estimativa da concentração de poluentes, cada modelo por suas particularidades tende a apresentar valores distintos. Assim, tomando como exemplo as concentrações estimadas para o chumbo, em relação à MEI, verifica-se que, tomando como base o modelo apresentado por Holland apud Sax (1974), o valor estimado da concentração é cerca de 40 vezes menor que a MEI. Em se tratando do modelo de Briggs (Seinfeld, 1986), o valor estimado da concentração é cerca de 150 vezes menor do que a MEI, e pelo método da ASME (Seinfeld, 1986) este valor é cerca de 1000 vezes menor.

Nota-se entre os três modelos, que existem diferentes relações entre os valores encontrados. A estimativa da concentração de poluentes pelo modelo de Holland apud Sax (1974), apresenta valores menores que a MEI, variando de 1,5 vezes menor para o Arsênio, a até 3000 vezes menor para a Prata.

Tomando como parâmetro de comparação os valores reais de Holcomb & Pedelty (1992), relativos a concentração de metais pesados emitidos por uma fábrica de cimento, em testes de co-processamento de resíduos, chegou-se a valores médios de concentração, cerca de 3,5 vezes maior adotando-se o modelo da ASME, 8,5 vezes maior com o modelo de Briggs e cerca de 450 vezes maior adotando o modelo apresentado por Holland.

Observando os gráficos das Figuras (9) e (10), pode-se notar que a medida que aumenta a altura efetiva da pluma, o nível de concentração de poluentes diminui; e com relação à distância na qual a concentração é maior, a mesma tende a afastar da fonte emissora. Além disso, fixando uma altura efetiva , calculada conforme a Eq.(3), e calculando as concentrações para diferentes classes de estabilidade, a medida que se passa da Classe A para a Classe C e posteriormente para a Classe E, verifica-se que a distribuição da dispersão ao longo do eixo (no sentido da direção do vento) tende a ser mais estável.

Com base nestes resultados, verifica-se que a estimativa da altura efetiva de subida da pluma, após a saída da chaminé, constitui um importante parâmetro, para se obter valores muito próximos do real.

Sabendo-se da diferença na ordem de grandeza dos modelos, a adoção deste ou daquele modelo, uma vez conhecida a sua distorção, representará um certo grau de segurança a ser adotado, implicando em menores riscos para a atividade de co-processamento.

REFERÊNCIAS

- Ahluwalla, S.C. and Page, C.H., "Effect of Low Grades, Combustible Wastes and Non-Tradi-cional Raw Materials". 9th Internacional Congress on the Chmistry of Cement, pp. 82-122.
- Holcomb, L.C. and Pedelty, J.F. (1992). "Exposure to Emissions from Cement Kilns Burning Waste-Derived Fuels Compared to Health Based Standards." Air & Waste Management Association, 85th Annual Meeting & Exhibition, Kansas City, Missouri, USA, June, 21-26.
- Masters, G.M., "Introduction to Environmental Engineering and Science". Prentice-Hall International, Inc., USA, 1991.
- Morais, S. (1993). "Utilização de Fornos de Cimento para Destruição Térmica de Resíduos Industriais." Revista Brasileira de Engenharia Química, Vol. XIII, N°.2, Dezembro, pp. 19-21.
- Ramos, M.D., Menon, G.J., Silva, R.J., "Estudo da Dispersão Atmosférica de Poluentes Emitidos a Partir da Queima de Resíduos Perigosos", XIII Congresso Brasileiro e II congresso Ibero-Americano de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil, 1995.
- SAX, N.I. (1974). "Industrial Pollution" Van Nostrand Reinhold Company.
- Seinfeld, J.H. (1986). "Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution". California Institute of Tecnology, Pasadena, California.
- Silva, R.J., Rossi, L.F., Nebra, S.A., "Consideration About the Use of Secondary Fuels in Cement Plants", 7th International Symposium on Transport Phenomena in Manufacturing Process, The Pacific Center of Thermal-Fluids Engineering, UNAM, Acapulco, México, August 28-31, pp.4-8, 1994.
- Silva, R.J., "Análise Energética de Plantas de Produção de Cimento Portland", Tese de Dotourado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campinas-SP, Brasil, 1994.

ABSTRACT

This paper presents the results of comparison of pollutants dispersion models on atmosphere. This pollutants are emitted by stacks of cement industry rotary kilns. When burning either industrial hazardous wastes or urban wastes as an alternative fuels, it is necessary to estimate the pollutant concentrations near the industry and to compare with the maximum individual exposition (MEI), as required for the purpose of not occurring health damages to persons leaving in this region. There is a great variety of dispersion models and this work gives emphasis on different manners to estimate effective height of the plume, which is one of the necessary parameters for the evaluation of pollutant concentration.

ABCM

COMPARAÇÃO ENTRE SOLUÇÃO NUMÉRICA E UMA SOLUÇÃO EXATA CONDICIONADA DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ATMOSFÉRICA

Rogério Silveira de Queiroz[1], Hermes Vazzoler Jr.[2] e Maxsuel M. Rocha Pereira[2].
1- Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito.
2- Programa de Mestrado em Engenharia Ambiental Universidade Federal do Espírito Santo
Caixa Postal 01-9011 - 29060-900 - Vitória - ES -Brazil
E-mail : rqueiroz@inf.ufes.br

RESUMO

Diferentes abordagens numérica e analíticas são usadas para o cálculo de concentrações integradas lateralmente devido à dispersão de contaminantes lançados em uma atmosfera com uma conhecida capacidade dispersiva, avaliada por parâmetros que indicam a importância relativa entre a turbulência gerada por fricção e a turbulência gerada por empuxo. Várias formulações foram testadas para o tensor difusividade turbulenta para uso na solução numérica por volumes finitos e na solução exata da equação de difusão atmosférica. Os resultados mostram que a solução exata condicionada deve ser preferida por ser mais conservativa e por ser de implementação simples, enquanto a modelagem gaussiana tende a subestimar valores ao longo de maior parte do domínio. A solução numérica elíptica apresenta forte dependência da formulação de difusividade, gerando uniformidades de concentração a pequenas distâncias da fonte.

INTRODUÇÃO

O uso de modelos para previsão de concentrações de contaminantes atmosféricos tem aumentado a partir da década dos setentas devido à necessidade de estudos de impactos ambientais que novos empreendimentos podem causar a uma dada região. Tornou-se bastante comum o uso de modelos genericamente classificados como gaussianos que, em essência, traduzem probabilidades de existência de uma certa quantidade de contaminante em uma região do espaço estudado, segundo Seinfeld (1986). A equação de difusão atmosférica de um dado contaminante, já efetuadas as simplificações devidas às diferenças entre ordens de grandeza das difusividades moleculares e devidas à ação da turbulência, permite soluções analíticas desde que certas relações existam entre o campo de velocidades e a componente inferior extrema da diagonal principal do tensor difusividade turbulenta, conforme Huang (1979). Tirabazzi (1994) e Queiroz e Santos (1995) exploraram a solução proposta por Huang, calculando concentrações no nível do solo e comparando-as com valores avaliados por modelagem gaussiana e com valores experimentais, considerando fontes pontuais múltiplas. Soluções numéricas por volumes finitos para as equações de conservação de momentum, massa e energia foram obtidas anteriormente por Queiroz et al. (1995), supondo a existência de ilhas de calor ao longo da direção principal de escoamento e a contaminação por fonte pontual. O objetivo deste trabalho é comparar os três tipos de soluções, mapeando um campo de concentrações lateralmente integrado, sob diferentes capacidades dispersivas da atmosfera, abrangendo as condições instáveis, quando a estrutura de turbulência gerada por empuxo torna-se mais importante na dispersão do que a gerada por fricção. Não foram considerados acidentes térmicos ou ilhas de calor ao longo da direção principal do escoamento, por ser um problema de abordagem pouco significativa quando da modelagem gaussiana.

DESCRIÇÃO DOS MODELOS

A finalidade das modelagens mostradas a seguir é expressar uma solução para a equação:

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\bar{u}_j\langle c\rangle\right)+\frac{\partial}{\partial x_j}\left\langle u_j' c'\right\rangle = D\frac{\partial^2\langle c\rangle}{\partial x_j \partial x_j}+S\left(\underline{x}\right) \quad (1)$$

Modelos gaussianos. A estrutura dos modelos gaussianos é elaborada a partir da associação de probabilidades de transição conforme mostrado na Eq. (2):

$$C(\underline{x},t)=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} Q\left(\underline{x},t|x_o,t_o\right) C\left(x_o,t_o\right) dx_o + \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{t_o}^{t} Q\left(\underline{x},t|\underline{x}',t'\right) S\left(\underline{x}',t'\right) dt'\, d\underline{x}' \quad (2)$$

onde $Q\left(\underline{x},t|\underline{x}',t'\right)$ é uma probabilidade de transição entre as posições $\underline{x}$ e $\underline{x}'$, entre os tempos t e t', S são as fontes e C as concentrações.

A organização das informações de probabilidades de transição na Eq. (2) é feita através do uso de uma distribuição normal para a velocidade do vento e da aceitação de que os fatores originários da capacidade dispersiva do ambiente, ou seja, a manifestação das estruturas turbulentas geradas por empuxo e fricção estejam associadas à velocidade do vento por funções genéricas. As distribuições das velocidades teriam a forma mostrada na Eq. (3) e as funções genéricas as formas mostradas na Eq. (4).

$$\phi\ (u) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma_u} exp\left[-\frac{(u_1 - \bar{u}_1)^2}{2\sigma_u^2}\right] \quad (3)$$

$$\sigma_z = \sigma_3 t F_z \quad \text{e} \quad \sigma_y = \sigma_2 t F_y \quad (4)$$

onde t é o tempo, σ_3 e σ_2 são desvios padrões das flutuações da velocidade do vento e F_z e F_y, funções que caracterizam a camada limite atmosférica.

As configurações da expressão de dispersão gaussiana tomam formas similares a

$$C(x_1, x_2, x_3) = \frac{q}{2\pi\ \bar{u}_1\ \sigma_y\ \sigma_z} \exp\left(-\frac{x_2^2}{2\sigma_y^2}\right) \left[\exp\left(-\frac{(x_3 - h)^2}{2\sigma_z^2}\right) - \exp\left(-\frac{(x_3 + h)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right] \quad (5)$$

sendo q o lançamento em $(0,0,h)$.

Os valores dos coeficientes de dispersão σ_y e σ_z foram avaliados por diversos experimentos para curtos tempos de amostragem e são extrapolados para tempos maiores. As formas funcionais mais utilizadas são do tipo:

$$\sigma = \exp\left[I + J \ln x_1 + K\left(\ln(x_1)\right)^2\right] \quad (6)$$

Considerando-se que sua obtenção se dá a partir das hipóteses de uma atmosfera com turbulência homogênea e permanente, o que não deve condizer com os estados reais, pode ser inferido que a grande carga de informações necessárias aos parâmetros σ_y e σ_z torna as expressões gaussianas de utilidade apenas indicativa da ordem de grandeza de concentrações decorrentes de lançamentos em um dado espaço sob estudo. Também é claro que, ao longo do desenvolvimento de uma pluma de contaminante, acidentes locais na estrutura de turbulência devem afetar o ambiente sem detecção por parte dos fatores σ, que são função apenas da distância percorrida e da estabilidade atmosférica.

Solução numérica. A solução numérica utilizada para comparação está exaustivamente descrita em Queiroz et al. (op cit.) e foi centrada na aplicação do método de volumes finitos à equação de conservação da espécie contaminante:

$$\frac{\partial\ (U_j)}{\partial X_j} = \frac{\partial}{\partial X_j}\left(K\ \frac{\partial C}{\partial X_j}\right) \quad (7)$$

associada às condições de contorno:

$$\begin{array}{llll} X_1 = 0 & C = 0 & X_2 = 0 & \dfrac{\partial C}{\partial X_2} = 0 \\ X_1 = 1 & \dfrac{\partial C}{\partial X_1} = 0 & X_2 = Z_i/D & \dfrac{\partial C}{\partial X_2} = 0 \\ X_1 = \dfrac{X_{Lanç}}{D} \quad \text{e} & & X_2 = \dfrac{H}{D}, & C = 1 \end{array} \quad (8)$$

onde Z_i é a altura da camada de mistura, D o domínio estudado em X_1 e $X_{Lanç}$ a localização do ponto emissor.

O campo de velocidade Uj é proveniente da solução anterior das equações de continuidade e quantidade de movimento linear acoplada à conservação de energia. Foi usado o modelo k-ε para a avaliação dos efeitos turbulentos via solução das equações de conservação da energia cinética turbulenta k e sua taxa de dissipação ε.

As informações sobre a estrutura dispersiva do meio, além da influência direta do campo de velocidades, estão contidas no tensor difusividade turbulenta K. Várias formulações foram usadas e seu comportamento com a altura mostrado na Figura 1.

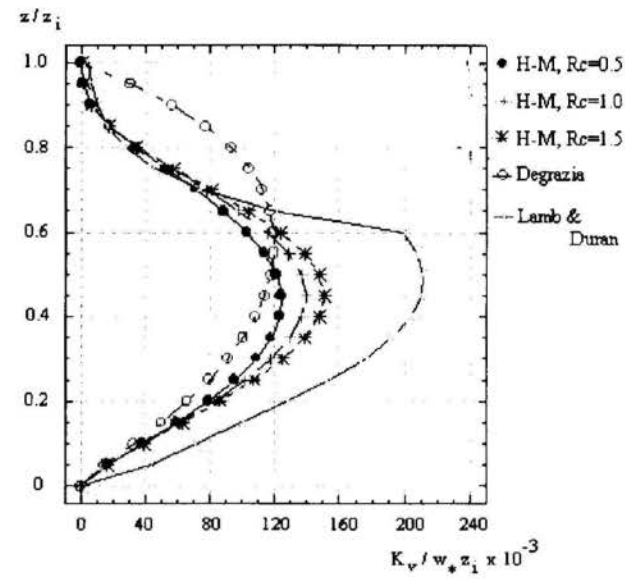


Figura 1- Comparação entre os perfis da componente vertical do tensor difusividade turbulenta K_{vv}, derivados de Holtslag & Moeng (H-M), Degrazia e Lamb & Duran.

Solução exata condicionada. A solução exata proposta por Huang (1979) é condicionada a que os perfis da velocidade na direção principal do escoamento e a componente inferior extrena da diagonal principal, do tensor difusividade turbulenta tenham formas potenciais, conforme mostrado nas expressões (10) e (11)

$$C = \frac{q}{\sqrt{2\pi\ \sigma_y}} \exp\left(-\frac{(x_2 - x_{2s})^2}{2\sigma_y^2}\right) \frac{(x_3 x_{3S})^{(1-n)/2}}{b\alpha^2 x_1} \exp\left[-\frac{a\left(x_3^2 + x_{3S}^2\right)}{b\alpha^2 x_1}\right] I_{-\beta}\left[\frac{2a\ (x_3 x_{3S})^{\alpha/2}}{b\alpha^2 x_1}\right] \quad (9)$$

onde q é a intensidade das fontes, $I_{-\beta}$ é a função de Bessel modificada da ordem $-\beta$, σ_y a dispersão horizontal, $\alpha = 2+p-n$ e $\beta = (1-n)/\alpha$ desde que:

$$u_1(x_3) = a x_3^p \quad (10)$$

e

$$K_{vv} = b x_3^n \quad (11)$$

Quanto à aproximação de K_{vv} por uma função do tipo $K_{vv} = bx^n$ foram feitos testes com formulações existentes devidas a Degrazia (1994), Hostlag e Moeng (1991) e Lamb e

Duran (1971) que são mostradas na Tabela 1, que identifica os casos estudados.

Tabela 1- Casos estudados. Z_S - altura de lançamento, Z_i - altura da camada de mistura, $\overline{u}_1$ - velocidade a $x_3/Z_i = 0.02$.

CASO		I	II	III
Z_S/Z_i		0.15	0.25	0.25
$\overline{u}_1$ (m/s)		1.0	2.0	3.0
Classe estabilidade		A	B	C
w_* (m/s)		0.52	0.62	0.69
u_* (m/s)		0.13	0.23	0.33
L		-19.0	-62.0	-133.0
Formulação K_{vv}		Degrazia	Hostlag & Moeng	Lamb & Duran
Interpolação	a	0.66	1.24	1.80
	p	0.18	0.21	0.22
K_{vv}	b	0.10	0.10	0.14
u_1	n	1.10	1.25	1.23
Abrangência		40%	40%	40%
$(u_*/w_*)^3$		0.0149	0.0491	0.1045

A abrangência, citada na Tabela 1, significa até que altura foram interpolados valores para a geração da função.

Resultados gerados pelos modelos. Foram estudados os casos mostrados na Tabela 1, sendo que os valores dos parâmetros são utilizados quando solicitados pelos diferentes modelos, gaussiano, solução numérica ou solução exata condicionada. Foi considerada a similaridade de capacidade dispersiva para as três classes de modelos através da comparação entre o comprimento de Monin-Obukhov (L), Eq. (12), a escala convectiva de velocidade (w_*), Eq. (13), e a classe de estabilidade. O comprimento de Monin-Obukhov é expresso por

$$L = -\frac{\rho . C_p T_o u_*^3}{k g \overline{q}_3} \qquad (12)$$

onde ρ é a massa específica do fluído, C_p o calor específico, T_o a temperatura do solo, u_* a velocidade de fricção, k a constante de Von-Kármán e $\overline{q_3}$ o fluxo cinemático turbulento de calor na direção 3. A escala convectiva é expressa por

$$w_* = \left(\frac{g}{T_o} \frac{\overline{q}_3}{\rho \; C_p} Zi \right)^{1/3} \qquad (13)$$

Para a classe de problemas estudada, o valor absoluto de L determina a altura até a qual os efeitos de fricção ainda têm importância na geração de turbulência. Quanto maior o fluxo cinemático de calor turbulento na superfície do solo, menor o valor absoluto de L.

Dessa forma, a modelagem gaussiana utiliza a velocidade do vento medida a uma altura de 10 m e uma insolação tal que reproduza a atmosfera sob condições muito próximas àquelas descritas pelo comprimento de Monin-Obukhov e pela escala convectiva de velocidade calculadas para a solução numérica e para a solução exata condicionada. Por outro lado, a solução numérica e a solução exata condicionada foram conseguidas para os mesmos valores de L e w_*.

O parâmetro $(u_*/w_*)^3$, indica o grau de instabilidade associado ao problema. Quanto menor o seu valor, mais instável o ambiente e, portanto, maior sua capacidade dispersiva.

Os resultados obtidos estão mostrados ,sob a forma gráfica, nas Figuras 2,3,4,5,6,7,8,9 e 10.

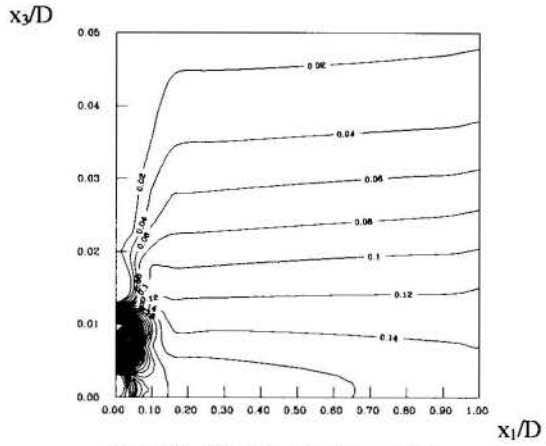


Figura 2 - Caso I, solução numérica.

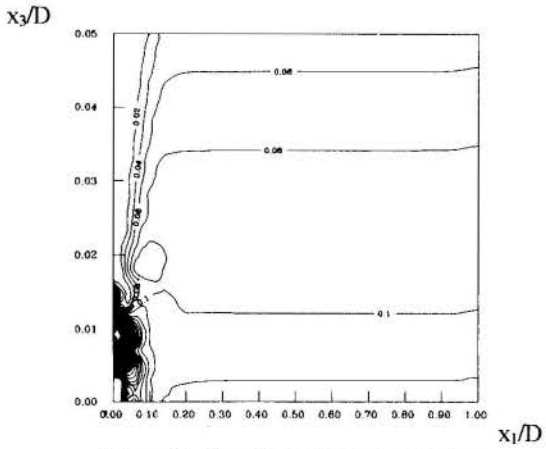


Figura 3 - Caso I, modelagem gaussiana, correspondente à classe A.

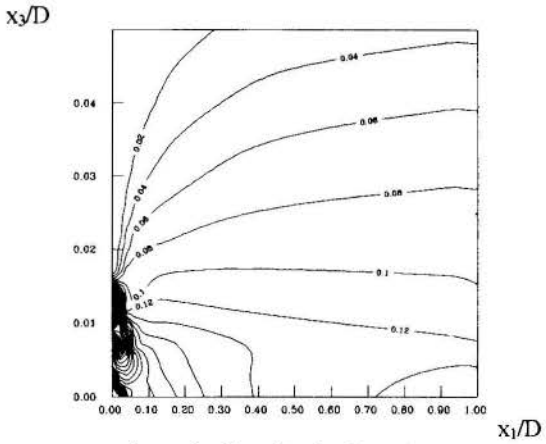


figura 4 - Caso I, solução exata.

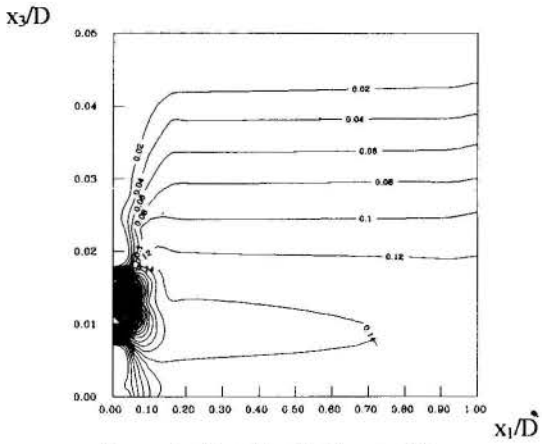


figura 5 - Caso II, solução numérica.

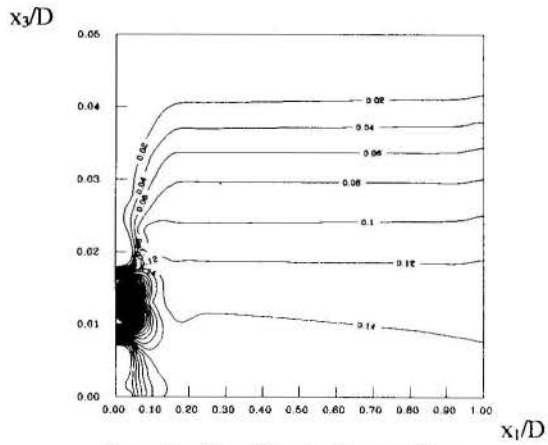


figura 8 - Caso III, solução numérica.

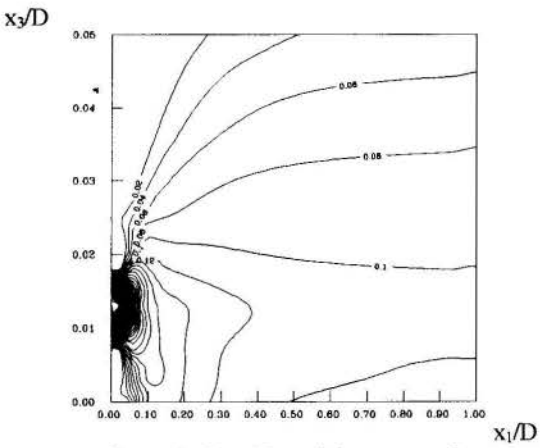


Figura 6 - Caso II, modelagem gaussiana correspondente à classe B.

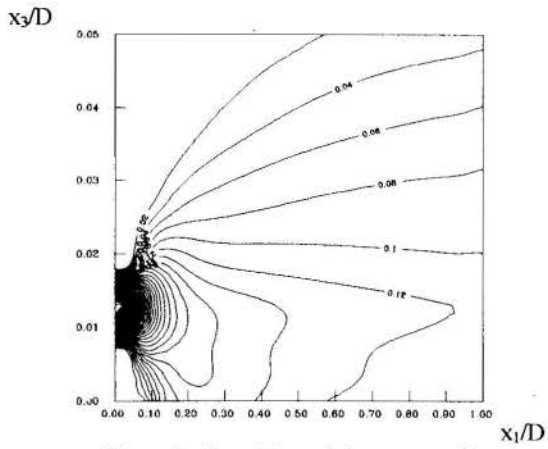


Figura 9 - Caso III, modelagem gaussiana correspondente à classe C.

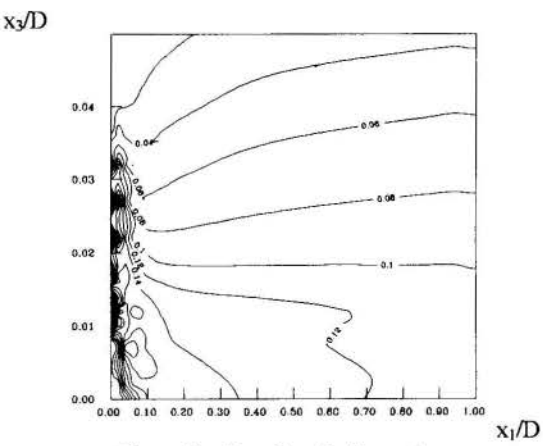


Figura 7 - Caso II, solução exata.

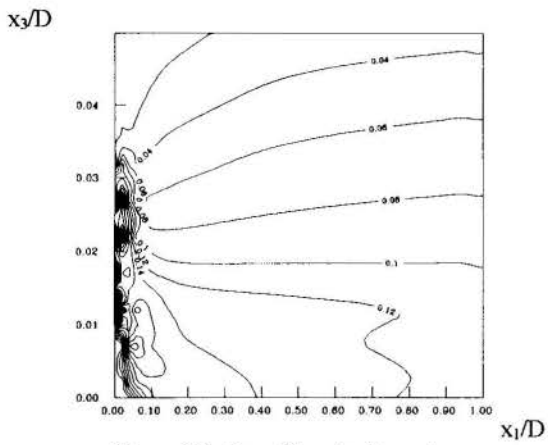


Figura 10 - Caso III, solução exata.

Quando foram simuladas as condições mais dispersivas possíveis, mostradas nas figuras 2, 3 e 4 a solução numérica mostra uma tendência da linha de concentração típica de 12% da massa das seções verticais ao longo da direção principal do escoamento a se manter acima da altura de lançamento, o que não se reproduz para o modelo gaussiano e para a solução exata. Na modelagem gaussiana existe um grande espalhamento após x_1/D = 0.1, levando ao cálculo de concentrações menores que com o uso dos outros dois métodos para essa região, em alturas inferiores à de lançamento. A solução exata condicionada mostra um espalhamento crescente, com suavidade, e linhas de isoconcentração maiores que 0.1 tendendo a se dirigir à fronteira inferior.

Para as condições de instabilidade forte, mostradas nas figuras 5, 6 e 7, a solução numérica apresenta comportamento com homogeneidade após $x1/D$ = 0.2 exceto pela linha de 0.14 que fecha um campo com acontecimento até x_1/D = 0.7. A modelagem gaussiana mostra concentrações maiores restritas a x_1/D < 0.4 e uniformização bem mais tardia que a solução numérica. Devido à condição de reflexão total no solo uma linha de isoconcentração igual a 0.1 reaparece em x_1/D = 0.5. A solução exata mostra um inesperado grande espalhamento inicial, que sempre se manifesta quando são simuladas grandes alturas de lançamento. Há um problema de comportamento na avaliação das funções de Bessel pelas séries numéricas usadas neste trabalho, para o par x_1/D < 0.10 e Z_s/D > 0.012, acontecendo severas oscilações numéricas cuja atenuação é restrita pelo máximo expoente possível para exponenciais, que comprometem os valores de concentrações gerados. Apesar dessa limitação, como a solução é pontual, os valores de concentração calculados para o restante do domínio estão corretos, sendo que após x_1/D = 0.5 guardam grande semelhança com a formulação gaussiana. O espalhamento maior que o previsto pela solução numérica e linhas de maior valor atingem a fronteira inferior após x_1/D = 0.6.

Para condições com instabilidade menos acentuada, a solução numérica, Figura 8, mostra apenas uma ligeira diferença de comportamento mesmo para uma mudança de 112% em $(u_*/w_*)^3$ e com o dobro de L, em relação à condição anteriormente analisada. Apenas a linha de 0.14 tem comportamento diverso, com forte translação de sua influência no domínio.

A modelagem gaussiana, Figura 9, reflete melhor a mudança da condição de instabilidade.

A solução exata para instabilidade menos acentuada, Figura 10, revela novamente a pseudo dispersão inicial devida ao comportamento numérico das funções de Bessel para grandes alturas de lançamento. Observa-se também uma modesta translação na influência de algumas linhas de isoconcentração que tocam a fronteira inferior (linhas 0.12 e 0.14) mesmo para mudanças acentuadas em L em relação ao caso mostrado na Figura 7.

As concentrações calculadas pelos três modelos a x_3/Z_i = 0.05 são mostradas nas Figuras 11, 12 e 13. Pode ser claramente observada a existência de máximos que se deslocam para a frente no domínio x_1 com a diminuição da instabilidade do ambiente, para os modelos exato e gaussiano. Existe uma inequívoca tendência em se manifestar a capacidade de subestimativa do modelo gaussiano.

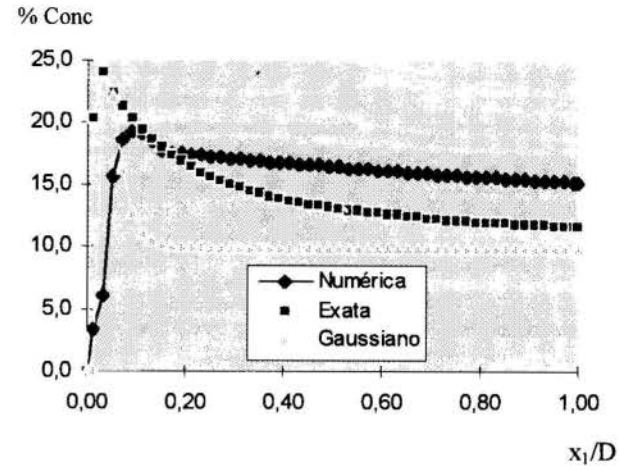


Figura 11 - Concentrações porcentuais a x_3/Z_i, caso I.

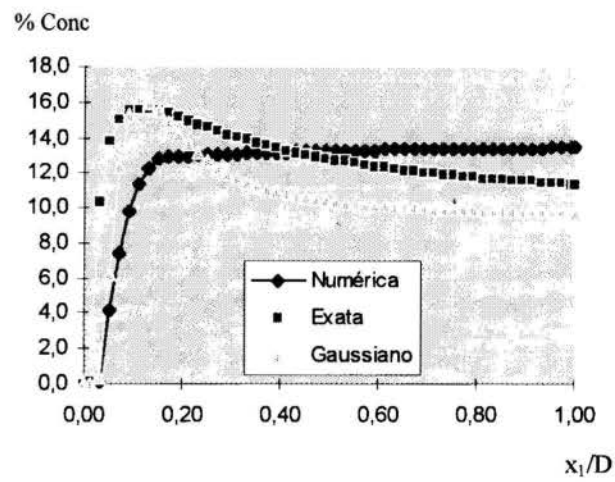


Figura 12 - Concentração porcentuais a x_3/Z_i, caso II.

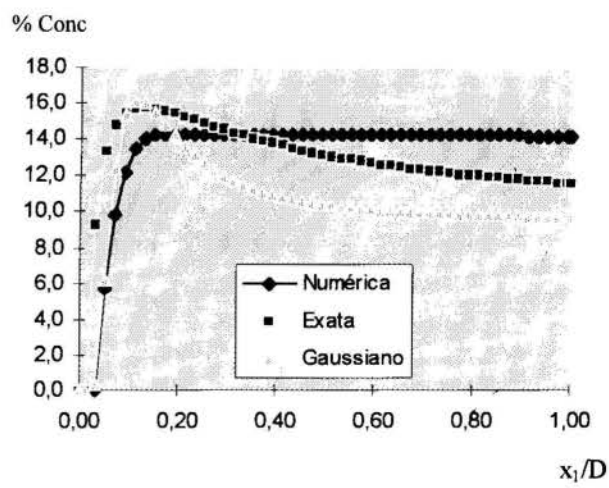


Figura 13 - Concentrações porcentuais a x_3/Z_i, caso III.

CONCLUSÃO

Os casos analisados neste trabalho permitem concluir que a solução exata deve ser usada com cautela para o início do domínio devido a problemas inerentes ao cálculo das funções de Bessel de ordem não trivial. A formulação de K_{vv} e sua interpolação para uso na solução exata determinam grandes mudanças nos valores calculados. Conforme já verificado na solução numérica, a instabilidade reflete-se de maneira modesta quando o contaminante liberado a grandes alturas, tipicamente acima de um terço do domínio vertical, indicando que o campo de velocidades turbulento e os valores de K_{vv} não captam as mudanças de posição de massas contaminantes devidas aos movimentos com escalas maiores (ordem típica de 1000 metros), comuns na atmosfera instável, conforme Wyngaard (1992). A modelagem gaussiana mostra tendências a calcular valores maiores que os demais modelos no início do domínio, subestimando porém as concentrações na maior parte da região de estudo. Ainda não sendo completamente viável o mapeamento de uma região inteira, sujeita a lançamentos de centenas de fontes, usando soluções numéricas para a equação de dispersão atmosférica, o uso da solução exata condicionada devida a Huang mostra-se mais conservativa, devendo ser preferida em estudos de impactos ambientais. A modelagem gaussiana indica apenas ordens de grandeza das concentrações na fronteira inferior do escoamento, principalmente em regiões distantes do lançamento (cerca de 3000 metros em estudos de impactos atmosféricos), devendo ser usada com restrições.

Estudos em andamento deverão comparar valores obtidos pelas três modelagens usadas neste trabalho a dados experimentais para concentrações de SO_2. Como serão usados valores oriundos de dois anos de observação de variáveis meteorológicas e de concentrações em um local específico, com médias horárias, a avaliação dever prover informações complementares ao presente estudo.

REFERÊNCIAS

Degrazia, G. A. e Carvalho, J.C., 1994, "Parametrização do Transporte Turbulento de Contaminantes na Camada Limite Convectiva", *Relatório de Atividades*, USP - IAG - DCA.

Holtslag, A. A. M. and Moeng, C.H., 1991, "Eddy Diffusivity and Countergradient Transport in the Convective Atmospheric Boundary Layer", *Journal of the Atmospheric Sciences* , 48 , 14 , pp.1690 - 1698 .

Huang, C. H., 1979, "A Theory of Dispersion in Turbulent Shear Flow", *Atmospheric Environment*, 13, pp. 453 - 463 .

Lamb, R. and Neiburger, M., 1971, "An Interim Version of a Generalized Urban Air Pollution Model", *Atmospheric Environment*, 5, pp. 239 - 264 .

Seinfeld, J. H., 1986, *Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution*, John Willey & Sons .

Queiroz, R.S. et al, 1995, "Influência de Ilhas de Calor na Capacidade Dispersiva Atmosférica", *Revista Brasileira de Ciências Mecânicas*, vol XVII, n^0 3, pp. 314 - 321 .

Queiroz, R. S. e Santos, J. O., 1995, "Avaliação do Uso de Modelos Simplificados da Difusividade Turbulenta na Modelagem da Dispersão de Gases na Atmosfera", *18º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental*.

Tirabassi, T. and Rizza, U., 1994, "Applied Dispersion Modelling for Ground Level Concentrations from Elevated Sources", *Atmospheric Environment*, 28, 4, pp.611-615.

Wyngaard, J. C., 1992, "Atmospheric Turbulence", *Annual Review of Fluid Mechanics*, 24, pp.205-233.

ABSTRACT

Different analytical and numerical aproaches are used for crosswind integrated concentrations calculations due to the dispersion of contaminants released in an environment with known dispersive capacity, evaluated by parameters that show the importance of turbulence generated by friction and turbulence generated by buyoancy. Several diffusivity tensor formulations were tested in numerical solution by finite volumes scheme and in an exact solution for the atmospheric diffusion equation. The results show that an exact solution, dependent on vertical diffusivity and velocity profiles approximations, must be used in real problems because of the conservative features of the results and easy implementation, while the values predicted by a traditional gaussian model seem to be underestimated. The elliptic numerical solution is strongly dependent on difussivity formulation, generating a uniform concentration field at short distances from the source.

TURBULENT WATER CHANNEL FLOWS UNDER SURFACE WIND ACTION

Jucá, P.C.S. and Maliska, C.R.
Computational Fluid Dynamics Laboratory - SINMEC
Department of Mechanical Engineering - UFSC
88040-900 - Florianópolis - SC - Brazil

SUMMARY

This work reports the last improvements and tests in a numerical model designed to simulate the circulation and pollutant transport in water bodies and coastal waters. The introduction of a $\kappa - \varepsilon$ turbulence model in the numerical model and the ability to incorporate surface winds condttions acting over the dispersion plumes are related and tested against experiments.

INTRODUCTION

Water is one of the basic natural resources of human being. The conservation and protection of our environment is therefore of great importance to our well-fare or even to our existence. Industrialization, besides the social progress, produce huge quantities of waste materials to be disposed of, so sewage discharges are significant pollutant sources for many urban estuaries and coastal areas. In particular, if sufficient rain storm occurs, municipal and industrial sewage discharges may exceed the capacity of existing wastewater treatment plant and discharge directly to the surface of the receiving water bodies.

To understand the circulation and pollutant transport in water bodies and coastal waters several numerical techniques have been developed in the last two decades. Most recently 3D numerical models have been implemented with different degrees of complexity in order to simulate more accurately the physical phenomena involved in this kind of problem, as can be seen in Fisher (1981), Jin (1993) and Huang and Spaulding (1995), among others.

In the scope of this research project Maliska et all (1987) proposed a 2D model for surface discharge using boundary-fitted grids. Following, Jucá et all (1989), reported a 3D model also using generalized coordinates. Recently, Jucá (1994) presented a complete 3D model for thermal and pollutant dispersion.

The present work reports the last improvements in the numerical model, where a κ–ε turbulence scheme was incorporated to the original model (Jucá and Maliska, 1995). To validate it, a rectangular channel flow with a surface wind was simulated and compared with the experiments of Yu (1987).

THE MATHEMATICAL MODEL

Due to the irregular shapes of general water bodies, the discretization employed is self-conforming to the boundaries. If an structured grid is used, as in this work, the governing equations are easily managed using a coordinate transformation. Using ϕ to represent any of the dependent variables, the general conservation equation can be written as

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{J}\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial\xi}(\rho U\phi) + \frac{\partial}{\partial\eta}(\rho V\phi) + \frac{\partial}{\partial\gamma}(\rho W\phi) = -\hat{P}^{\phi} + \hat{S}^{\phi} \\
&+ \frac{\partial}{\partial\xi}\left[\left(\alpha_{11} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right) + \left(\alpha_{12} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right) + \left(\alpha_{13} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\gamma}\right)\right] \\
&+ \frac{\partial}{\partial\eta}\left[\left(\alpha_{21} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right) + \left(\alpha_{22} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right) + \left(\alpha_{23} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\gamma}\right)\right] \\
&+ \frac{\partial}{\partial\gamma}\left[\left(\alpha_{31} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right) + \left(\alpha_{32} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right) + \left(\alpha_{33} J\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial\gamma}\right)\right]
\end{aligned} \tag{1}$$

where U,V,W are the contravariant components of the velocity given by:

$$\begin{aligned}
U &= (u_1\xi_x + u_2\xi_y + u_3\xi_z)\,J^{-1} \\
V &= (u_1\eta_x + u_2\eta_y + u_3\eta_z)\,J^{-1} \\
W &= (u_1\gamma_x + u_2\gamma_y + u_3\gamma_z)\,J^{-1}
\end{aligned} \tag{2}$$

where the α_{ij} are the components of the metric tensor and J the jacobian of the coordinate transformation. As stated, ϕ represents the dependent variables for each equation. For $\phi = 1, u_1, u_2, u_3$, the mass conservation equation, momentum in x, y and z Cartesian coordinates directions, are recovered, respectively. Γ represents the diffusivity transport coefficient, being zero for the mass conservation equation and equals to the effective viscosity for the Navier-Stokes equations. Also in Eq. (2) u_i represents the mean of fluctuating Cartesian velocities as defined by Rodi (1980). Details of the coordinate transformation can be found in Maliska (1995).

The term P^{ϕ} is zero for the mass conservation equation. For the Navier-Stokes equations it is the pressure term given by

$$\hat{P}^{u_i} = \left[\frac{\partial p}{\partial\xi}\bar{\xi}_i + \frac{\partial p}{\partial\eta}\bar{\eta}_i + \frac{\partial p}{\partial\gamma}\bar{\gamma}_i\right] \tag{3}$$

where the subscript indicates partial derivative in the "i-th" Cartesian direction. The source term S^{ϕ} is zero for mass conservation equation and for the Navier-Stokes equations it is written as

$$\hat{S}^{u_i} = \frac{\partial}{\partial\xi}\left[\left(J\mu_{ef}\frac{\partial U}{\partial\xi}\right)\bar{\xi}_i + \left(J\mu_{ef}\frac{\partial U}{\partial\eta}\right)\bar{\eta}_i + \left(J\mu_{ef}\frac{\partial U}{\partial\gamma}\right)\bar{\gamma}_i\right]$$
$$+ \frac{\partial}{\partial\eta}\left[\left(J\mu_{ef}\frac{\partial V}{\partial\xi}\right)\bar{\xi}_i + \left(J\mu_{ef}\frac{\partial V}{\partial\eta}\right)\bar{\eta}_i + \left(J\mu_{ef}\frac{\partial V}{\partial\gamma}\right)\bar{\gamma}_i\right] \quad (4)$$
$$+ \frac{\partial}{\partial\gamma}\left[\left(J\mu_{ef}\frac{\partial W}{\partial\xi}\right)\bar{\xi}_i + \left(J\mu_{ef}\frac{\partial W}{\partial\eta}\right)\bar{\eta}_i + \left(J\mu_{ef}\frac{\partial W}{\partial\gamma}\right)\bar{\gamma}_i\right]$$

Eq. (1), representing the system of partial differential equations governing the channel flow, is integrated in time and in a 3D elemental control volume. The pressure-velocity coupling is handled using the SIMPLEC method of Van Doormaal and Raithby, (1984). Fictitious control volumes are used for the application of the boundary conditions. The resulting linear system of equations are of the form:

$$\begin{aligned} A_p\phi_p = {} & A_e\phi_E + A_w\phi_W + A_n\phi_N \\ & + A_s\phi_S + A_d\phi_D + A_f\phi_F \\ & + A_{ne}\phi_{NE} + A_{se}\phi_{SE} + A_{nw}\phi_{NW} \\ & + A_{sw}\phi_{SW} + A_{de}\phi_{DE} + A_{fe}\phi_{FE} \\ & + A_{dw}\phi_{DW} + A_{fw}\phi_{FW} + A_{dn}\phi_{DN} \\ & + A_{ds}\phi_{DS} + A_{fn}\phi_{FN} + A_{fs}\phi_{FS} + b_p \end{aligned} \quad (5)$$

for $\phi = 1, u_1, u_2, u_3$. An equation for pressure is derived from the mass conservation equation using the SIMPLEC method. Due to the 3D nature of the problem, numerical details and expressions of the coefficients are not given. These can be found in Jucá, (1994), Marchi, (1992) and Maliska, (1995). To deal with turbulent flows a $\kappa-\varepsilon$ turbulence model was implemented. So, in Eq. (1) the effective viscosity are defined by $\mu_{ef} = \mu_t + \mu_l$, where μ_{ef}, μ_t, and μ_l are the effective, turbulent and laminar viscosity, respectively. The turbulent viscosity is given by

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (6)$$

where $C_\mu = 0.09$, ρ is the density of the water and κ and ε are the turbulent kinetic energy and its turbulent dissipation, respectively. The transport equations for κ and ε also can be obtained from Eq. (1). For this, ϕ is made equal to κ and ε. The terms $\hat{P}^\phi$ are given by

$$\hat{P}^\kappa = \hat{P}^\varepsilon = 0 \quad (7)$$

for κ and ε. The source $\hat{S}^\phi$ terms are

$$\hat{S}^\kappa = \rho\hat{P}_{dt} - \rho\varepsilon \quad ; \quad \hat{S}^\varepsilon = \rho(C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{\kappa}\hat{P}_{dt} - C_{2\varepsilon}\frac{\varepsilon^2}{\kappa}) \quad (8)$$

The values for the constants are taken the usual ones recommended in literature, $C_{1\varepsilon} = 1{,}44$ and $C_{2\varepsilon} = 1{,}92$. These are current values used in this kind of flows as can be seen in Rodi (1980) and Huang and Spaulding, (1995). The production term $\hat{P}_{dt}$ in the transformed space is written as

$$\begin{aligned} \hat{P}_{dt} = J\mu_{ef}\{ & 2\left[\left(\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)\bar{\xi}_x + \left(\frac{\partial u}{\partial\eta}\right)\bar{\eta}_x + \left(\frac{\partial u}{\partial\gamma}\right)\bar{\gamma}_x\right]^2 \\ & + 2\left[\left(\frac{\partial v}{\partial\xi}\right)\bar{\xi}_y + \left(\frac{\partial v}{\partial\eta}\right)\bar{\eta}_y + \left(\frac{\partial v}{\partial\gamma}\right)\bar{\gamma}_y\right]^2 \\ & + 2\left[\left(\frac{\partial w}{\partial\xi}\right)\bar{\xi}_z + \left(\frac{\partial w}{\partial\eta}\right)\bar{\eta}_z + \left(\frac{\partial w}{\partial\gamma}\right)\bar{\gamma}_z\right]^2 \\ & + \left[\frac{\partial}{\partial\xi}(u\bar{\xi}_y + v\bar{\xi}_x) + \frac{\partial}{\partial\eta}(u\bar{\eta}_y + v\bar{\eta}_x) + \frac{\partial}{\partial\gamma}(u\bar{\gamma}_y + v\bar{\gamma}_x)\right]^2 \\ & + \left[\frac{\partial}{\partial\xi}(u\bar{\xi}_z + w\bar{\xi}_x) + \frac{\partial}{\partial\eta}(u\bar{\eta}_z + w\bar{\eta}_x) + \frac{\partial}{\partial\gamma}(u\bar{\gamma}_z + w\bar{\gamma}_x)\right]^2 \\ & + \left[\frac{\partial}{\partial\xi}(v\bar{\xi}_z + w\bar{\xi}_y) + \frac{\partial}{\partial\eta}(v\bar{\eta}_z + w\bar{\eta}_y) + \frac{\partial}{\partial\gamma}(v\bar{\gamma}_z + w\bar{\gamma}_y)\right]^2 \} \end{aligned} \quad (9)$$

The diffusivity transport coefficient Γ for the $\kappa-\varepsilon$ turbulence model, see Eq (1), are given by

$$\Gamma^\kappa = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \quad ; \quad \Gamma^\varepsilon = \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \quad (10)$$

where the constants have the values of $\sigma_\varepsilon = 1.30$ e $\sigma_\kappa = 1.0$

BOUNDARY CONDITIONS

Typically, in an environmental flow we have solid boundaries represented by the shoreline and by the bottom of the water body. At the surface the wind acts over the dispersion of the pollutant plume causing its superficial spreading and / or bending. For solid and surface boundaries no normal flux of momentum is allowed. The turbulent stresses at the solid boundaries, σ_b, are determined by

$$\sigma_b = \frac{k_v v_b}{\ln\left(\frac{\Delta Z_b}{Z_0}\right)} \quad (11)$$

where v_b is the component of the velocity *parallel to the boundary* $k_v = 0.41$ is the Von Karman constant; ΔZ_b the distance from the boundary to the nearest grid point and Z_0 a parameter dependent on the local boundary roughness, Jin (1993), assuming hydraulically smooth flow. Eq. (11) indeed assumes that the velocity near the solid boundaries matches the logarithmic law of the wall, and for that, sufficient mesh resolution must be provided near the boundary. At the surface the wind stress is often calculated by (Huang and Spaulding, 1995)

$$\sigma_w = \rho_w C_d v_{wind}^2 \quad (12)$$

where C_d is the air-water drag coefficient, ρ_w the air density and v_{wind} it's velocity, measured at 10 m. height. In the present work, the stresses due to wind are know from experimental data.

The stresses at the boundary imposes the boundary conditions for the velocity. As a simple example, if the plane xy is parallel to the surface and bottom, and z is the depth direction of the water body, the bottom stress there can be approximated by

$$\sigma_{ib} = \mu_{ef}\left(\frac{u_{ib} - u_{ip}}{2Z_p}\right) \tag{13}$$

where "i" represents the "i-th" Cartesian direction (i = 1,2).

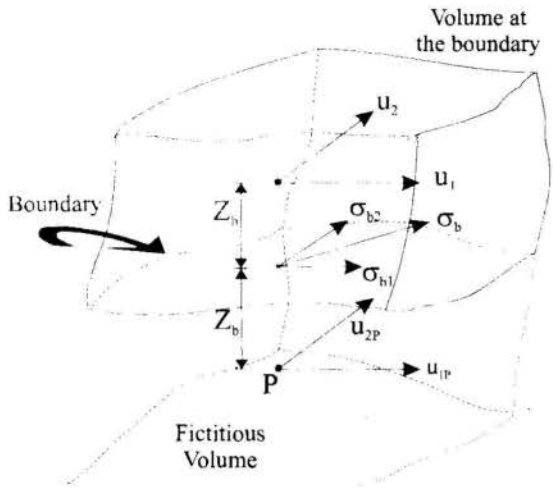


Fig 1 - Turbulent tension sketch at the boundary

Rewriting

$$u_{ip} = u_{ib} - \left(\frac{2Z_p\sigma_{ib}}{\mu_{ef}}\right) \tag{14}$$

which imposes the boundary conditions for the velocity. The turbulent kinetic energy and its dissipation at solid boundaries are determined following Rodi (1980), as

$$\kappa_b = \frac{v_*^2}{(C_\mu)^{0.5}} \quad ; \quad \varepsilon_b = \frac{v_*^3}{k\Delta Z} \tag{15}$$

At the bottom the resulting shear velocity is

$$v_* = \sqrt{\frac{(\sigma_{1b}^2 + \sigma_{2b}^2)^{0.5}}{\rho}} \tag{16}$$

where v_* is the friction velocity at the bottom. With the surface stress the κ and ε values at the surface can be calculated using Eq. (15)

MODEL VERIFICATION

Comparisons of the mathematical model against analytical or experimental results are a necessary step in any model development.

In this work it was chose to compare the proposed model with a systematic experimental study of turbulent channel flows induced by wind at the free surface carried out by Yu (1987) as partially related in Jin (1993). The experiment was realized in a flume 38 m long, with a cross section of 0.80 m x 0.59 m, as show in Fig. 2. The flume was provided with a roof, a suction ventilator at one end of the flume and an air intake at the other end. So, a driving air current could be created. The velocity of the air current (u_a) was measured 10 cm above the water surface and ranged from 3.7 m/s to 8.0 m/s during the experiment.

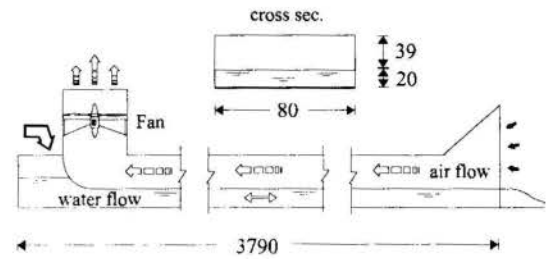


Fig. 2 - Experimental apparatus of Yu (1987). Dimensions in cm.

The still water depth (D) was maintained at 20 cm. Steady water flows was created using a pump with mean cross-sectional velocities varying from 4.75 cm/s to 21.4 cm/s. The flow in the water could be in a direction either following the wind or opposing it and the test section was located near the middle of the flume where the depth was little affected by wind-setup of the free surface. The bottom of the flume was made of cement and all flow tests were found to be in the hydraulic smooth regime $k_v = 0.41$ is the Von Karman constant; ΔZ_b the distance from the boundary to the nearest grid point and Z_0 a parameter dependent on the local boundary roughness..

Using the measurements of the centerline velocity profiles, Yu proposed two logarithmic profiles, one for the flow near the surface and another for the flow near the bottom. Upon examining these formulations Yu obtained the values of the surface friction velocity (u_s^*) and the equivalent bottom roughness height (Z_0) by means of the profile method. Table 1 shows the conditions of typical experimental runs choose to compare against the mathematical model proposed.

Table 1 - Experimental data from Yu (1987)

Run	$\bar{u}_w$	u_a	u^*_s	Z_0
	cm/s	m/s	cm/s	mm
1	5,0	-5,70	0,929	0,2570
2	10,40	-5,70	0,856	0,0553
3	14,10	-5,70	0,852	0,0486
4	18,00	-5,70	0,895	0,0491
5	10,40	8,00	1,016	0,3790
6	14,10	8,00	0,993	0,1340
7	18,00	8,00	1,010	0.0187
8	21,40	8,00	1,010	0.0268

In Tab. 1 the signal (-) in the velocity of the air (u_a) means it is blowing against the water flow.

It is important to note that the mean water velocity reported in Jin (1993) **is not** the experimental flow rate over the entire cross section, as a first reading of his work suggests. The mean water velocity in Table 1 is obtained by integrating the experimental center velocity profile over the channel depth only. In other words, it is the average of an infinitely large channel where the side walls have no influence in the velocity profiles. This fact was confirmed by adjusting a 4th degree polynomial curve to the experimental points and performing the integral over

the depth which leads to the mean water velocities listed in Table 1.

NUMERICAL SIMULATION OF THE CHANNEL FLOW

Two simulations of the channel flow were performed. The first one for comparing the model against the available experimental results. In this one the channel was considered infinitely large so the data in Table 1 is well suited. In the second case the side wall were considered in order to appreciate the performance of the mathematical model when more than one solid boundary were present and a fully 3D flow exists.

For the large channel, symmetry boundary conditions were applied in the north and south boundaries, as show in Fig 3.

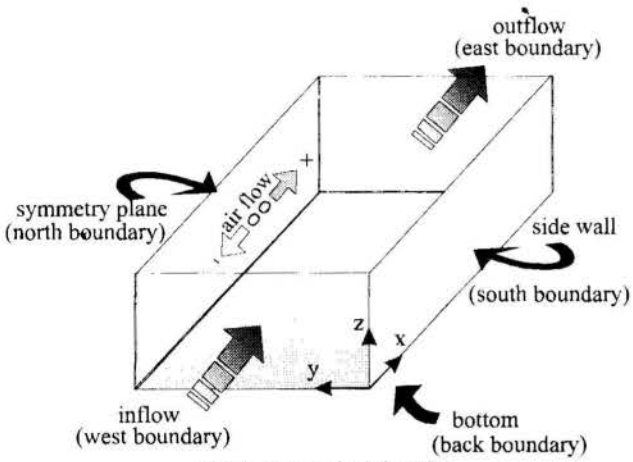


Fig. 3 - Numerical domain

In the west face, the inflow boundary condition applies in all cases. Since no information about the inlet velocity profile in the flume where available, an uniform velocity profile ($\bar{u}_w$) was imposed. For the turbulent kinetic energy and its dissipation, boundary conditions as proposed by Demuren and Rodi (1983) were taken

$$\kappa = 0.004\, u_{in}^2 \quad ; \quad \varepsilon = C_\mu \frac{\kappa^{1.75}}{0.09\, b} \tag{17}$$

where b is the channel width. At the east boundary a parabolic boundary condition were applied for all variables. Therefore

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi} = 0 \qquad \text{for} \quad \phi = u_i\, , \kappa\, , \varepsilon \tag{18}$$

At the bottom and at the surface of the water (front and back), and at the south wall (in the second case), the boundary conditions for velocities were applied as described in Eq (14). For $\kappa-\varepsilon$ the boundary conditions are taken from Eq (15) with the friction velocity from Table 1 at the surface, and from Eq (11) and Eq (15) for solid boundaries.

For the infinitely large channel case, the domain discretization were made with a rectangular Cartesian mesh with 80x5x21 (x,y,z) volumes. In all cases, for numerical computations, half of channel width were taken due to the symmetry of the flow (15,0x0,4x0,2 m.). In the case were there exists the lateral wall (south face) a Cartesian regular mesh of 80 x 15 x 21 volumes (x, y, z) volumes where used.

RESULTS

Figure 4 and 5 depicts the center line vertical velocity (u_l) profile against the experimental measurements of Yu (1987).

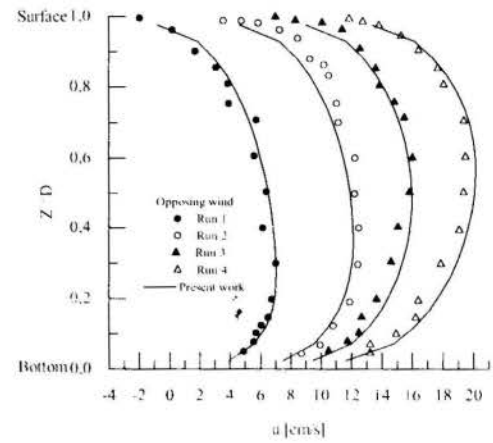


Fig. 4 - Center line vertical profile. Opposing wind cases

As could be observed by the numerical results, at the section test the profile was fully developed for all run cases in table 1.

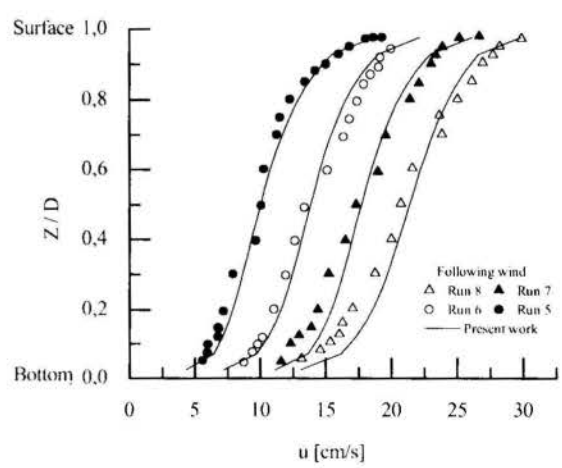


Fig.5 - Center line vertical profile. Following wind cases.

The numerical results show a very good agreement with the experimental measurements, pointing out that the proposed mathematical modeling suits well for channel flows, considering the $\kappa-\varepsilon$ turbulence model equations.

In the opposing wind cases is interesting to note the run 1 where the velocity at the surface is against the direction of flow imposed at inflow boundary. In the remaining cases the opposing wind acts like a wall with different roughness values, retaining the velocity profile at the surface.

Jim (1993) used 2D $\kappa-\varepsilon$ model for modeling the channel flow as reported in case one. For some runs he reported the μ_{ef} profiles. These profiles are show in Fig 6 against the resulting profiles obtained in the present work for the large channel case.

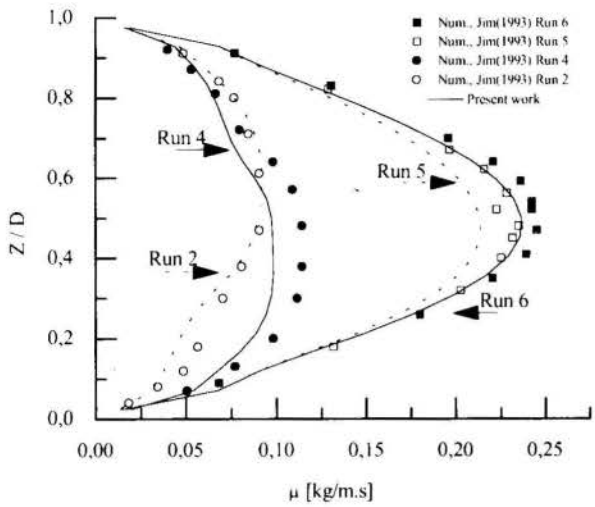


Fig 6 - Effective viscosity profiles

The resulting numerical μ_{ef} profiles are quite similar and show a good agreement, mainly if considered that the $\kappa-\varepsilon$ model was applied under different hypothesis for Navier-Stokes equations and solution methods.

Figure 7 depicts the center line vertical velocity u_l profile for the second case were the lateral (south) wall is present. In this case the channel flow is better simulated, as soon as the influence of the wall is taken over the velocity profiles. This is more close to the reality of low aspect ratios channels. The shape of the curves are similar to the ones of case 1 however there are no experimental results available to comparisons.

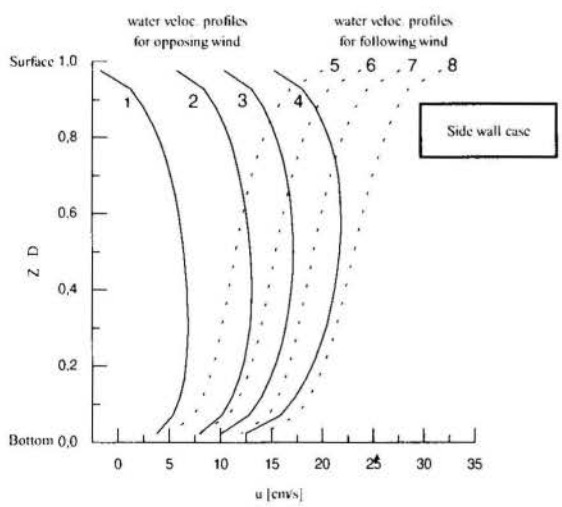


Fig. 7 - Velocity profiles for the finite channel case.

As in the preceding case, in the run 1, the resulting surface velocity is against the imposed water profile in west boundary, although the reverse flow is lower. It's due the presence of the lateral wall that leads to great velocity profiles in the center line, lowering the reversal flow caused by the wind.

Figure 8 present the μ_{ef} profile for the same runs presented before, but for the wall channel case. Comparison between Fig 8 and 6 show that, as expected, the profiles are similar but larger values of μ_{ef} are present.

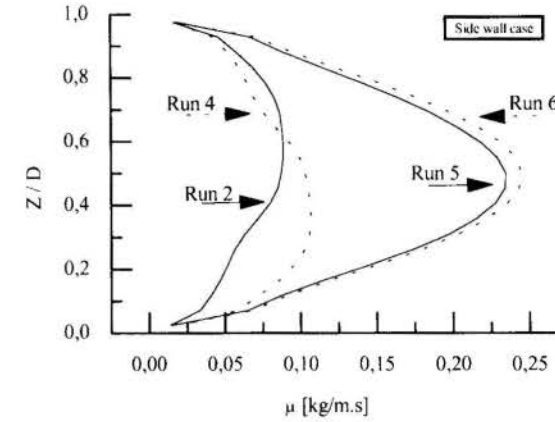


Fig.8 - Effective viscosity profiles for the side wall case.

CONCLUSION

Due the agreement of the numerical results with the experimental data available for the channel flows under different flow rates and wind situations we can conclude that the mathematical modeling is well suited for the physics analyzed.

To reach the final goal of the model a conservation equation for chemical species or energy conservation equation will be soon incorporated in order to simulate pollutant dispersion or heat discharges in water bodies and coastal water.

The overall agreement of the velocity profiles comparisons also shows that the boundary conditions are appropriate and its implementation is correct.

REFERENCES

Demuren, A .O. , Rodi, W., 1983, "Side Discharges into Open Channels: Mathematical Models", J. Hydr. Eng., ASCE, 109(12), pp. 1707-1722

Van Doormaal, J.P., Raithby, G.D., 1984, "Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Flüid Flow", Num. Heat Transfer, vol. 7 pp. 147-163

Fisher, H.B., 1981, "Transport Models for Inland and Coastal Waters", New York, Academic Press, 542 pp., Proceedings of a Symposium on Predictive Ability.

Huang, W., Spaulding, M., 1995, "3D Model of Estuarine Circulation and Water Quality Induced by Surface Discharges", Journal of Hydraulic Eng., vol. 121, No 4, pp. 300-311.

Jin, X.Y., 1993, "Quasi-Tridimensional Numerical Modeling of Flow and Dispersion in Shallow Water", Communication on Hydraulic and Geotechnical Engineering, Dp of Civil Eng., Delft Univ. of Technology, Rep. 93-03, ISSN 0169-6548.

Jucá, P.C.S., Silva, A.F.C., Maliska, C.R.,1989, "Solução Numérica de Problemas Tridimensionais Elípticos de Convecção de Calor", X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, pp. 161-164, Rio de Janeiro, Brazil

Jucá, P.C.S., 1994, "Modelagem Tridimensional Turbulenta da Dispersão de Poluentes em Corpos D'água de Geometria Variável", Exame de Qualificação do Curso de Pósgraduação em Engenharia Mecânica, UFSC, Centro Tecnológico; Universidade Federal de Santa Catarina

Jucá, P.C.S., Maliska, C.R .1995, "Tridimensional Simulation of Pollutant Dispersion in Water Bodies", XVI Congresso Íbero Americano sobre Métodos Computacionais para Engenharia, vol. 1, pp. 640-649.

Maliska, C.R., Silva, A.F.C., Polina, S., Perez, J.A.O., 1987, "Heat Transfer Predictions of Thermal Discharges in Water Bodies", IX Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, pp. 45-48, Florianópolis, SC, Brazil

Maliska, C.R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional: Fundamentos e Coordenadas Generalizadas", Livros Técnicos e Cientificos Editora

Marchi, C.H., 1992, "Solução Numérica de Escoamentos Tridimensionais Viscosos em Qualquer Regime de Velocidade", Dissertação de Mestrado, Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico, Universidade Federal de Santa Catarina

Rodi, W., 1980, "Turbulence Models and Their Application in Hydraulics", Int. Assoc. for Hydraulic Research , Delft, Netherlands.

Yu, X., 1987, "Turbulent Channel Flow under the Action of Surface Wind Stress", Internal Report No 2-87, Lab. Of Fluid Mechanics , Dpt of Civil Engineering, Delf Univ. of Technology.

A FINITE ELEMENT MODEL BASED ON THE SUPG METHOD FOR SHALLOW WATER WAVES

Carlos Carbonel H., Augusto Cesar Galeão, Abimael Dourado Loula

Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC/CNPq).

Rua Lauro Muller 455, Rio de Janeiro-RJ ,Brazil

ABSTRACT

A two-dimensional finite element model for the shallow water wave equations is presented. This model is derived using a space-time Petrov-Galerkin formulation for which the improvement in the treatment of the advective terms is obtained from the employed SUPG approach.. Some numerical examples of long wave propagation show the advantages of the presented formulation. This finite element method is used for the analysis of tidal response in the shallow lagoon of Guarapina and the Bays of Ilha Grande and Sepetiba.

INTRODUCTION

Most of the main features of coastal ocean circulation problems as well as semi-enclosed coastal water configurations are concerned with the hydrodynamics effects induced by wind fields and tides.This clearly shows the importance of the numerical simulation of water flow in shallow water such as occurs in estuarine embayments and coastal seas. As it is well known, for this type of problem, finite difference models which range from explicit to fully implicit, have been used extensively, for example Leendertse(1967) and Casulli and Cheng(1992). Finite Element models using the classical semi-discrete Galerkin's method leads to an unnapropriate approximation for the convective term and consequently globally spurious oscillations can occur as long as convection dominated flows are concerned. To circumvent Galerkin's drawback approximation, weighted residual method based on a Petrov-Galerkin formulation were recently proposed. In Carbonel, Galeão and Loula(1995) a space-time PG finite element model was derived to simulate shallow water waves propagation in closed domains. For this model the conventional shallow water system of equations, written in terms of the mean vertically averaged velocities and the water surface elevation was employed. Due to the very different nature of these variables an uncoupled set of P-G weighting functions was used. In Bova and Carey(1995) and in Saleri(1995) semi-discrete P-G finite element models were also proposed for shallow water problems. In both papers symmetric forms of the shallow water equations were derived. In the first an entropy variable formulation was used and in the second this symmetrization is achieved writing the shallow water equations in terms of the velocity-celerity variables. In this paper a space-time description of the velocity-celerity shallow water equations is presented, from which a space-time P-G finite element model based on the SUPG method is proposed to simulate the hydrodynamics of semi-enclosed coastal configurations.

GOVERNING EQUATIONS

Assuming a hydrostatic pressure distribution (negligible vertical acceleration component), and integrating the incompressible Reynold's equations adopting depth-averaged horizontal velocities , we obtain the desired shallow water equations, which can be written as:

$$R_{,t} + A \cdot \nabla R = F \qquad (1)$$

$$A \cdot \nabla R = A^T \nabla R \qquad (2)$$

$$\nabla R^T = [u_{,x}, v_{,x}, \theta_{,x}, u_{,y}, v_{,y}, \theta_{,y}] \qquad (3)$$

where $\theta = 2\sqrt{gH}$

$$R^T = [u, v, \theta] \;;\; R_{,t}^T = [u_{,t}, v_{,t}, \theta_{,t}]$$

$$A^T = \begin{pmatrix} u & 0 & \sqrt{gH} & v & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & v & \sqrt{gH} \\ \sqrt{gH} & 0 & u & 0 & \sqrt{gH} & v \end{pmatrix} \;;$$

$$F = \begin{pmatrix} +fv - ru + \sigma W^x |W| H + \mu(u_{,xx} + u_{,yy}) + gh_{,x} \\ -fu - rv + \sigma W^y |W| H + \mu(v_{,xx} + v_{,yy}) + gh_{,y} \\ 0 \end{pmatrix}$$

In the above expressions H=h+ η is the total water depth. η(x,y,t) is the water surface elevation and h(x,y) is the water depth, both measured from the undisturbed water surface. u and v represent the depth-averaged velocities in x and y directions respectively and $\sqrt{gH}$ is the celerity. f is the Coriolis parameter. r is the friction coefficient and σ is the surface friction coefficient . W_x , W_y are the wind velocity components and μ is the eddy viscosity .

Now , if we define

$$\overline{A}^T = [I, A^T] \tag{4}$$

and

$$\overline{\nabla} R^T = [u_{,z}, v_{,z}, \theta_{,z}, u_{,x}, v_{,x}, \theta_{,x}, u_{,y}, v_{,y}, \theta_{,y}] \tag{5}$$

then the space-time solution of the original problem, is the (3x1)column vector R which satisfies the transformed equation

$$\overline{A} \cdot \overline{\nabla} R = F \tag{6}$$

where I is the (3x3) identity matrix, and z =(1) t, where (1) has units of velocity.

THE FINITE ELEMENT MODEL

According to the space-time Petrov-Galerkin finite element model proposed in Carbonel, Galeão and Loula(1995), given a space-time finite element partition $\pi^{h,\Delta t}$, such that :

$I_n = t_{n+1} - t_n = \Delta t$;

$S_n = \overline{\Omega} \times I_n$; $\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{N} \Omega_e$;

$\Omega_i \cap \Omega_j = \Phi$ for i≠j ;

$S_n = \bigcup_{e=1}^{N} S_n^e$;

$S_n^e = \Omega_e \times I_n$;

then, for n = 0,1,.... we will say that the space-time P-G approximate solution for the transient problem previously derived is the vector R^h , which satisfies:

$$\int_{S_n} \hat{R}^h \cdot L^h \, d\Omega \, dt + \sum_{e=1}^{N} \int_{S_n^e} (\overline{\Psi}\, \overline{A} \cdot \overline{\nabla} \hat{R}^h) . L^h \, d\Omega dt$$

$$+ \int_{\Omega} \hat{R}^h(t_n^+) \cdot [R^h(t_n^+) - R^h(t_n^-)] \, d\Omega = 0 \ ,$$

$$\forall \hat{R}^h \in \mathcal{U}_n^h \tag{7}$$

where

$$L^h = R^h_{,t} + A \ . \nabla R^h - F^h \tag{8}$$

is the residual and $\mathcal{U}_n^h$ is the appropriate space-time finite element subspace.

In the above expression the first integral comes from the classical Galerkin's formulation. The second, under the summation symbol, represents the added SUPG contribution, and the third integral is a jumping condition by which the information is propagated from S_{n-1} to S_n . The definition for the (3x3) symmetric matrix of the intrinsic time scales $\overline{\Psi}$ follows the methodology proposed in Shakib(1988).

NUMERICAL EXPERIMENTS

For the numerical examples that will be presented here linear interpolation in space and time will be used. Also a diagonal $\overline{\Psi} = \gamma I$ matrix will be adopted since for these examples $u, v << \sqrt{gH}$. As discussed in Ribeiro, Galeão and Landau(1996) in these cases

$$\gamma = \frac{h_e \Delta t}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta t^2 gH + h_e^2}} \right) \tag{9}$$

where h_e is a characteristic lenght of the element Ω_e .

The first experiment calculates the frictionless flow trough a horizontal channel of 5000 meters lenght, 20 meters wide and 10 meter depth, discretized in 10 elements of 500 meters. In the longitudinal direction, the channel is closed at the one boundary and open at the opposite boundary. At the open boundary, the system is subjected to a time dependent boundary condition suddenly raising the water level from the initial state of rest(10 meters) to 10.1 meters within one time step. The Figure 1 shows the water level elevation at the closed boundary of the channel calculated using our space-time SUPG model, the conventional Galerkin formulation and a full implicit model with SUPG contribution. A time step Δt= 40 seconds is used for the calculation. From the curves depicted in this figure it is quite clear the better behavior of the proposed model as compared to the others.

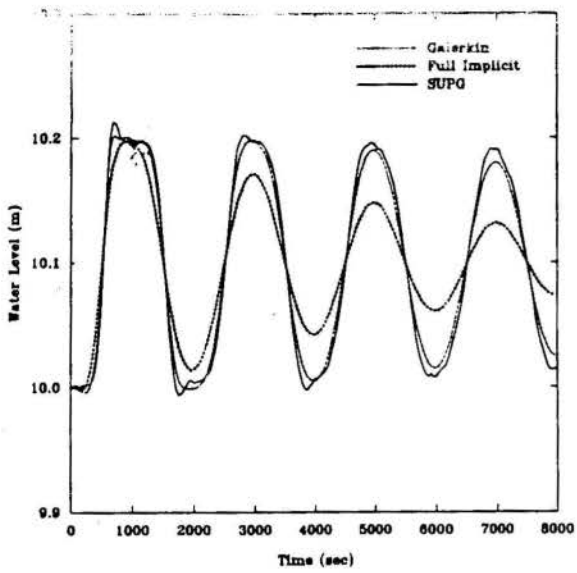


Figure 1. First numerical experiment. Water level variation at the closed side of the channel.

The second experiment deals with the dinamic response of the Guarapina lagoon located approximately 30 kilometers eastward of the city of Rio de Janeiro. This lagoon is connected to the sea by an entrance channel in Ponta Negra (Figure 2). This lagoon is part of an interconnected laggon system composed by the lagoons of Marica, Barra de Marica , Padre and Guarapina. The maximum depth in the Guarapina Lagoon reachs 2 meters and the observations reported in Kjerfve and Knoppers (1991), indicate a very poor contribution of sea water to this lagoon.

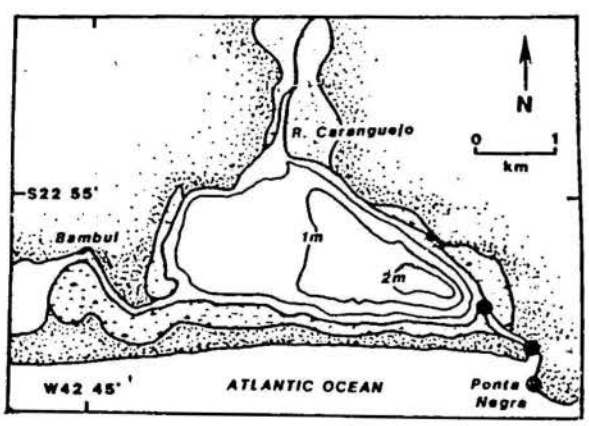


Figure 2. Guarapina Lagoon.

The finite element mesh used in this experiment is showed in Figure 3. The resulting discrete model possesses 200 triangular elements with 126 nodes. For the solid (closed) boundaries the slip condition is assumed. The basic parameter values used were the following: The fluid in the layers is initially at rest. The Coriolis parameter was taken as $f= -6 .10^{-6}$ sec^{-1} , corresponding to the southern hemisphere. The global friction coefficient was fixed at $r=1.2\ 10^{-6}$ sec^{-1} and the time step was defined as $\Delta t=100s$. The values of $\mu= 20\ m^2/s$ and $\sigma= 3.2\ 10^{-6}$ were adopted .

To study the effects of the tide level variation in the Guarapina lagoon, a typical tide represented as a sinusoidal signal having a period of 12 hours and an amplitude of 0.6 meter acting at the open boundary, was utilized. Figure 4 shows the transient response of the water level at the 3 control points of the model. The tide wave in point B, located at the end of the entrance channel, is clearly damped, reaching amplitudes in the range of only 10% the tide signal. The amplitudes calculated here are close to the observed amplitudes in this lagoon which according to Kjerfve and Knoppers (1991) reach up to 11% of the incoming tide.

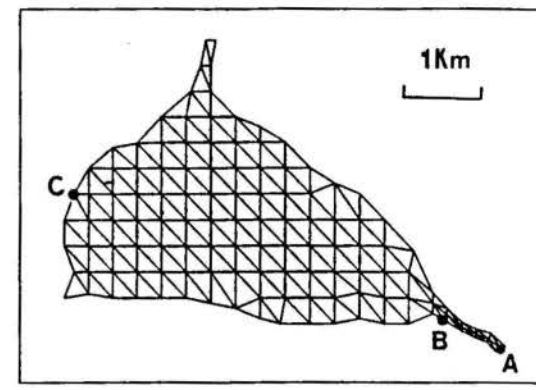


Figure 3. Computational Grid of Guarapina Lagoon.

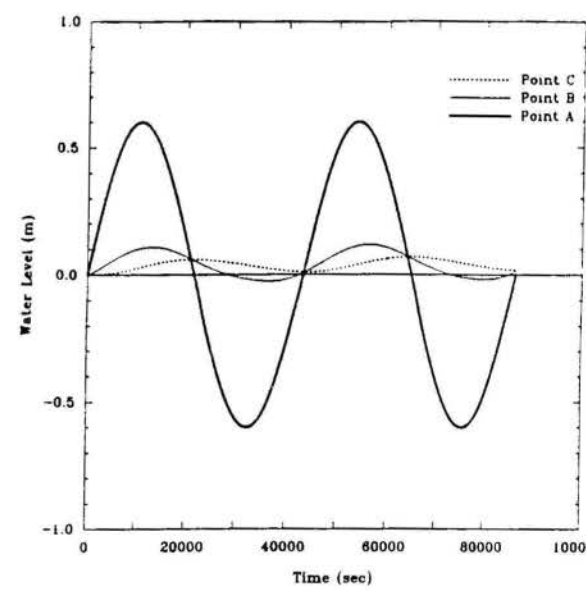


Figure 4. Water elevation time-history at the control points A,B,C.

The third experiment deals with the hydrodynamics of the coastal ocean system composed by the bays of Ilha Grande and Sepetiba in Rio de Janeiro(Figure 5). These two shallow water bodies are interconnected by the constriction(channel) formed between the continent and the island of Ilha Grande. The mean depths of these bays are around 28 and 14 meters respectively. Based on observational data, it was shown that the system formed by Sepetiba Bay and Ilha Grande Bay is partially mixed. A quasi-steady clockwise circulation around the Ilha Grande island has been observed in many occasions,with a duration larger than tidal periods(Signorini 1980).

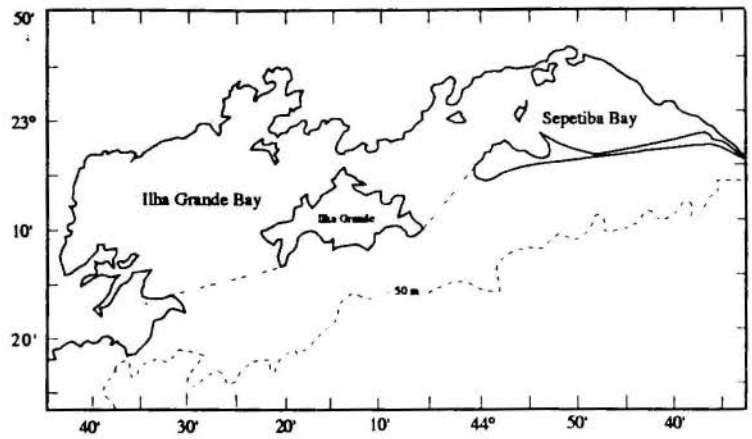


Fig. 5 Map of Ilha Grande Bay and Sepetiba Bay. (– – –)open boundaries; mathematical modeling.

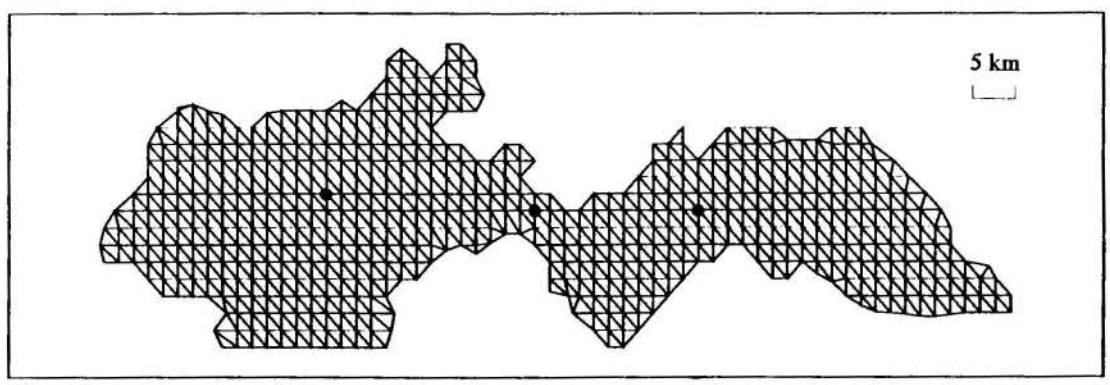


Fig. 6 Finite element model of the bays. The black circles indicates the location of the control points in Ilha Grande Bay, the Channel and Sepetiba Bay

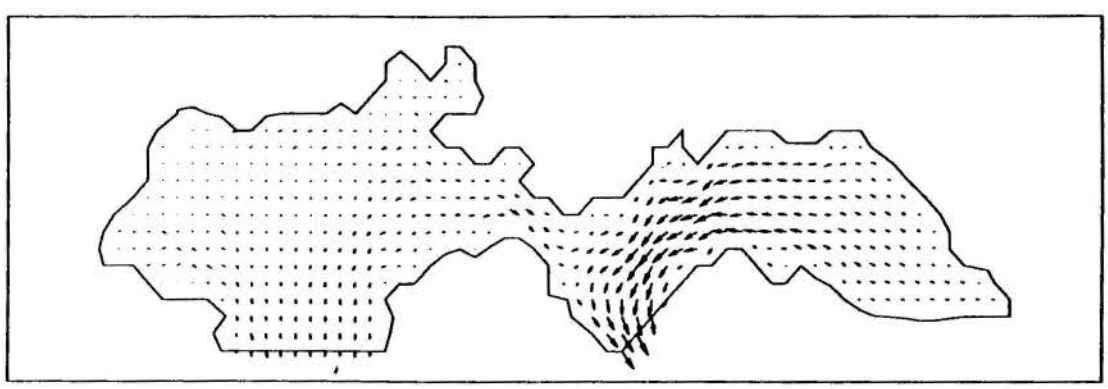


Fig.7 Velocity field at t=6 hours. The arrows are normalized to the maximum of 0.75 m/sec.

In this clockwise non-tidal circulation , shelf water would eventually enter the bay through its western opening to the ocean, circulate around the island and finally go out to the ocean through the eastern opening. This behaviour have suggested that the circulation in the bay is driven by non-tidal forces.

To evaluate the effects of the tide level variation in these bays the same typical tide having a period of 12 hours and an amplitude 0f 0.6 meters acting at the open boundaries was utilized.

The basic parameter values used in this experiments were the following: The fluid is initially at rest. The Coriolis parameter was taken as $f = -6 .10^{-6}$ sec^{-1} , corresponding to the southern hemisphere. The global friction coefficient was fixed at $r=1.2\ 10^{-6}$ sec^{-1} and the used time step was Δt=100s. The values of

μ= 50 m^2/s and σ= $3.2\ 10^{-6}$ were adopted . The parameter γ was chosen equal to 50 seconds. The spatial finite element mesh used is showed in figure 6. The resulting discrete model possesses 1075 triangular elements with 614 nodes.

The Figure 7 shows the velocity field in these bays, during the ebb time. The outflow in the system through the two oppenings is very clear .

Figure 8 shows the transient response of the water level at the 3 control points of the model. The highest amplitude occurring at the Sepetiba Bay control point could be explained by the largest amplification response effect due to the shallower depths of this bay as compared to the depths of Ilha Grande Bay. The secondary oscillation observed in Ilha Grande and at the channel control points can be explained considering the first longitudinal period of oscillation of the Ilha Grande bay (y direction) which is very close to the value of $T= 4L(gH)^{-1/2}$ = 6033 seconds , corresponding to the theoretical period of oscillation of a channel of L=25 000 meters lenght and H=28 meters depth.

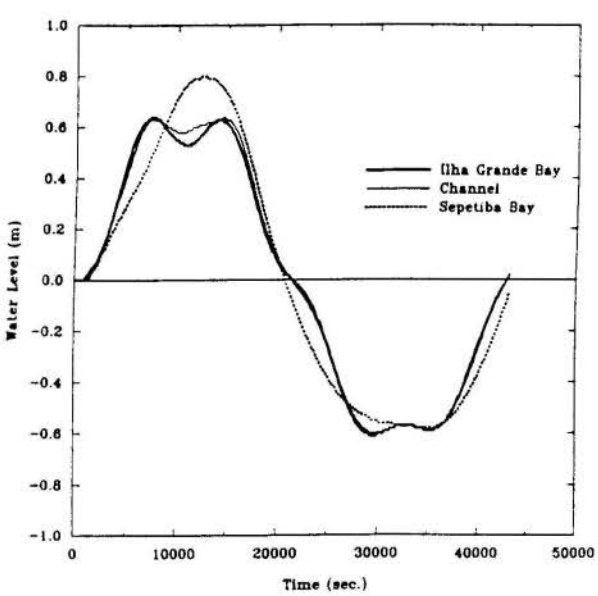


Figure 8. Water level time-history at the control points

CONCLUSIONS

In this paper a finite element model based on a SUPG formulation in space and time, is used to describe the hydrodynamics of semi-enclosed shallow water systems. Numerical experiments were performed to evaluate the ability of the presented model to describe shallow water wave propagation problems. The transient solution of a reflecting wave in a channel obtained with this model gives better approximations than other solutions. Two practical experiments of tidal propagation applied to the Guarapina Lagoon and to the Ilha Grande and Sepetiba bays were also performed. It was possible to verify the damping response of the water level in the Guarapina Lagoon to a representative tide signal during a day. In the experiment performed to evaluate the dynamic response of Ilha Grande and Sepetiba bays, the results indicate that the tide level signal in the Sepetiba bay is amplified in comparison to the Ilha Grande Bay.

REFERENCES

Bova, S.,W., Carey G.,F.(1995), "An Entropy Variable Formulation and Petrov-Galerkin Methods for the Shallow Water Equations", in Finite Element Modeling of Environmental Problems-Surface and Subsurface Flow and Transport, ed: G. Carey, John Wiley, London, England

Carbonel C., Galeão A.C., Loula A. (1995),"A Two Dimensional Finite Element Model for Shallow Water Waves".Proceedings of 13th. Brazilian Congress and 2nd. Iberian American Congress of Mechanical Engineering, Belo Horizonte, Brazil.

Casulli V. and Cheng R.T. (1992), "Semi-implicit finite difference Methods for Three-Dimensional Shallow Water Flow", International Journal for Numerical Methods in Fluids 15, pp. 629-648.

Kjerfve B.,Knoppers B.(1991)"Tidal Choking in a Coastal Lagoon",Tidal Hidrodynamics, edited by B.B. Parker, John Wiley & Sons,Inc.

Leendertse J.J. (1967),"Aspects of a Computational Model for Long-Period Water-Wave Propagation", Rand Memo RM - 5294-PR, Santa Monica, California.

Ribeiro F. L., Galeão A.C., Landau L.(1996), "A Space-Time Finite Element Formulation for the Shallow Water Equations". Submitted to : Envirosoft 96, Como, Italy(18-20 /09 1996).

Saleri,F. (1995),"Estabilization Techniques in Computational Fluid Dynamics". Proceedings of the Int. Conf. on Finite Element in Fluids, Venezia, pp.1487-1497.

Shakib F. (1988), "Finite Element Analysis of the compressible Euler and Navier Stokes Equations". Phd. Thesis, Stanford University.

Signorini S.,(1980), "A Study of the Circulation in Bay of Ilha Grande and Sepetiba. Part I. Based on Experimental Field Data". Bolm. Inst. Oceanogr. , Univ.Sao Paulo,Vol.9(1),pp.41-55.

MODELAMENTO MATEMÁTICO DO AQUECIMENTO DE BARRAS CILÍNDRICAS EM UM FORNO DE SOLEIRA ROTATIVA

Ledomiro Braga da Silva, M. Sc.
Mannesmann S.A. - Belo Horizonte

Márcio Ziviani, Dr.
Departamento de Engenharia Mecânica - UFMG - Belo Horizonte

O modelamento matemático do reaquecimento para laminação de barras cilíndricas em fornos de soleira rotativa, envolvendo simultaneamente condução, convecção e radiação térmica, resultou em um sistema de equações diferenciais parciais de segunda ordem, que foram solucionadas adotando-se o método de diferenças finitas com formulação em volumes de controle. Os parâmetros operacionais - tempo de forno e temperatura das zonas - foram estudados em função das dimensões e número de zonas do forno, do tipo de combustível usado e da especificação e bitola do aço, para avaliação dos resultados em relação à qualidade do aquecimento e ao consumo de energia. O modelo se aplica a situações de paradas, permitindo simulações de estratégias para redução do consumo de energia, das perdas por oxidação e dos riscos de superaquecimento.

INTRODUÇÃO

Neste estudo, desenvolve-se o modelamento matemático da transferência de calor em fornos de soleira rotativa para o aquecimento contínuo de barras cilíndricas semi-acabadas de aço, a serem transformadas em tubos sem costura através do processo de laminação a quente por mandris.

A pesquisa para o aperfeiçoamento da condução dos fornos na indústria siderúrgica é importante na busca da maior produtividade, com garantia da qualidade pela prevenção de problemas metalúrgicos durante o aquecimento, objetivando, ainda, menor formação de carepa, redução da descarbonetação superficial e economia de combustível.

A modelagem matemática do forno envolvendo simultaneamente condução, convecção e radiação térmica, resulta num conjunto de equações diferenciais parciais de segunda ordem não linear, uma vez que as propriedades físicas do aço, tais como condutividade térmica, massa específica e calor específico, a emissividade do gás, o coeficiente convectivo e o fluxo de calor radiante são funções da temperatura. A solução foi obtida numericamente através do método de diferenças finitas com formulação em volumes finitos, proposta por Patankar (1972).

O modelo calcula o perfil de temperatura da carga no forno e a vazão necessária de combustível em cada zona de controle, permitindo o estabelecimento das principais condições de operação - temperaturas das zonas e tempo de passagem no forno - para assegurar menor consumo de combustível, maior produtividade e melhor qualidade de aquecimento.

O modelo é aplicado a situações de paradas do forno, quando o ritmo da produção é zero. O estudo destes casos é importante no sentido de estabelecer estratégias para reduzir o consumo de combustível, as perdas por oxidação e prevenir riscos de superaquecimentos.

O FORNO ROTATIVO:

Pelas portas de enfornamento, barras cilíndricas de aço são colocadas sobre uma soleira giratória e transportadas através das zonas de aquecimento do forno. Após o seu aquecimento, na faixa de temperatura estabelecida, são retiradas pela porta de desenfornamento.

O carregamento e o descarregamento das barras são feitos simultaneamente por duas máquinas (enfornadeira e desenfornadeira). Entre os eixos das portas, tem-se uma ângulo *morto* sem carga. Assim, durante um giro completo da soleira do forno, uma barra movimenta-se em um ângulo correspondente a duas vezes π radianos menos este ângulo *morto*. A soleira movimenta-se intermitentemente através de um ângulo correspondente à distância de duas barras adjacentes. O movimento é lento e suave para que uma barra não role por sobre a outra. O passo da soleira determina o tempo de passagem de uma barra no forno, caso não haja interrupções.

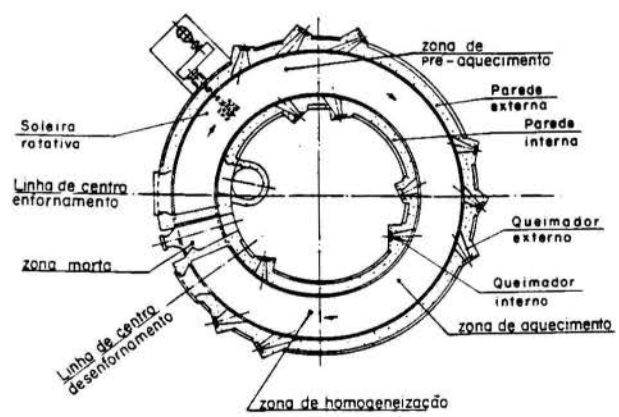


Figura 1 - Forno rotativo de 3 zonas de controle.

O PROCESSO DE AQUECIMENTO

Na direção do transporte da barra, o forno é subdividido em zonas de temperaturas controladas pelo suprimento automático de ar e combustível. São elas: *zonas de pré-aquecimento, zonas de aquecimento e zonas de encharque.* Cada zona do forno tem um termopar instalado verticalmente em uma posição definida na abóbada para a medição de sua temperatura. As temperaturas da zona variam de 1100 a 1350 °C e o controle do aquecimento da carga é consequência das temperaturas nas diversas zonas do forno e do tempo de permanência.

O forno pode ser aquecido por combustível líquido (óleo pesado) ou gasoso (Gás Natural, Gás de Coqueria, Gás de Alto Forno, etc.), cuja combustão se dá através de queimadores instalados à meia-altura entre a carga e abóbada do forno e distribuídos pelas paredes externa e interna.

São montadas paredes divisórias refrigeradas a água entre as portas de carregamento e descarregamento para evitar o resfriamento das barras quentes pela porta de carregamento e pelas

barras frias. Uma pequena distância é mantida entre a parede divisória e a soleira para a passagem livre das barras, para os casos em que se deseje avançar ou recuar a soleira carregada.

Existem selos de água para evitar a saída de gases quentes pelas frestas entre os contornos do raio externo da soleira e da parede externa e do raio interno da soleira e da parede interna.

Um adequado revestimento de concreto e tijolos especiais refratários e isolantes impede o fluxo de calor da câmara do forno para o ambiente externo.

Os produtos da combustão, também chamados de gases queimados, são retirados por uma saída localizada próxima à porta de carregamento.

A tiragem dos gases queimados é controlada através do sistema de exaustão composto de uma válvula de controle da pressão da câmara interna do forno, exaustor ou ventilador de tiragem induzida e chaminé. A pressão na câmara do forno é mantida ligeiramente positiva, na ordem de 10 a 20 Pa.

A atmosfera do forno é oxidante, porém mantém-se vigilância do teor de oxigênio livre presente nos gases dentro do limite de 2%, para evitar-se a formação excessiva de carepa

DISPOSIÇÃO DA CARGA / ZONAS DO FORNO

O forno rotativo é subdividido em zonas, cujos controles de temperatura são feitos através de termopares instalados ao final de cada zona, e a carga é composta de barras de aço redondas maciças (cilindros), igualmente espaçadas, conforme a ilustração esquemática abaixo, considerando cinco zonas de controle:

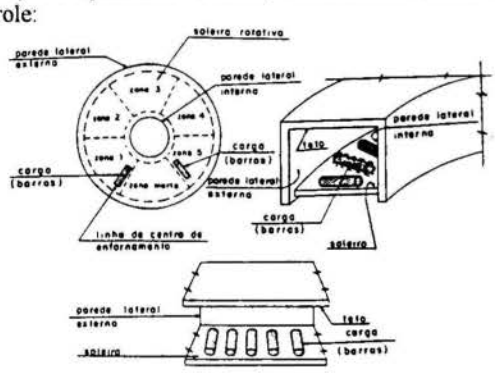


Figura. 2 - Disposição esquemática forno / carga
Forno rotativo de 5 zonas de controle

EFEITOS COLATERAIS NO AQUECIMENTO DOS AÇOS

Enquanto as barras de aço são aquecidas no forno rotativo, o material sofre diversos processos, chamados colaterais neste trabalho, envolvendo perda de material, tensões térmicas e mudanças nas propriedades físicas do aço, que podem ocasionar sérios problemas na qualidade do produto final, justificando um modelamento matemático do processo.

Sob altas temperaturas de aquecimento a superfície da barra de aço é oxidada e parte do material se perde sob forma de carepa. Esta redução de massa do metal, chamada de *perda por oxidação*, pode ser medida em quilogramas ou em porcentagem. Para fornos de reaquecimento para laminação a perda por oxidação entre 1 a 2% é vista como normal.

Na presença de vapores d'água, dióxido de carbono, hidrogênio e oxigênio, constituintes da atmosfera do forno, ocorre um fenômeno denominado *descarbonetação*. Ele consiste numa reação entre um gás descarbonetante e o carbono ou carbonetos do metal, formando produtos gasosos contendo mais carbono.

Durante os diversos passos de laminação a temperatura da barra diminui e por isso sua temperatura de aquecimento deve ser um pouco superior à indicada para o processo - em nosso caso entre 1150-1350 °C. Aquecimentos com temperaturas mais elevadas não são empregados, pois envolvem riscos de superaquecimento ou queima do metal.

Como se sabe, os corpos expandem-se com o incremento da temperatura e, se em alguma parte da barra não há grau de liberdade para a livre deformação com a variação de temperatura, surgem tensões, chamadas tensões a quente.

Durante o aquecimento, as camadas mais externas, de temperaturas mais altas, tendem a expandir e, assim, são comprimidas, enquanto as camadas mais interiores, mais frias, são sujeitas a tensões de tração.

No início do aquecimento, quando a carga está próxima à temperatura ambiente e a temperatura do forno na zona de entrada de material é da ordem de 1000 °C, a diferença de temperatura entre a superfície e o núcleo atinge seu valor máximo quando o aço é ainda insuficientemente plástico. O gradiente de temperatura neste período inicial de aquecimento não deve ultrapassar a 150 °C.

CURVA IDEAL DE AQUECIMENTO

Se o aquecimento do aço fosse feito com o forno à uma temperatura constante, poderiam ocorrer gradientes de temperatura no material no período inicial acima dos valores toleráveis. Além disto, deve-se lembrar que excessivas temperaturas podem ocasionar superaquecimento do material.

Para contornar estes problemas, adota-se a prática de dividir o aquecimento em três fases: pré-aquecimento, aquecimento e homogeneização.

. Fase de Pré-aquecimento

Até 800 °C as barras de aço são aquecidas praticamente sem descarbonetação periférica e carepa. Nesta fase, chamada de pré-aquecimento, a grande diferença de temperatura entre a câmara do forno e a carga provoca gradientes de temperatura mais acentuados na seção da barra, entre a superfície e o núcleo, que podem provocar tensões. Se a temperatura do forno é reduzida até que o aço torne-se suficientemente plástico, as tensões a quente ficam reduzidas a um mínimo.

. Fase de Aquecimento

Como o material já tornou-se plástico após a fase de pré-aquecimento, estabelece-se uma fase seguinte de aquecimento forçado, durante a qual a temperatura do forno é mantida em um valor máximo, observando-se, naturalmente, os limites de superaquecimento Se este subsequente aquecimento sob temperatura alta tiver um tempo menor, tem-se redução da oxidação e da descarbonetação.

. Fase de Homogeneização

Finalmente, como a temperatura do material atinge o valor especificado, pode-se abaixar a temperatura do forno e manter o tempo para assegurar uma perfeita homogeneização até o núcleo da barra de aço, na chamada fase de homogeneização.

O processo de aquecimento pode ser desenvolvido mais rapidamente se a temperatura da superfície do aço é aumentada durante o período de aquecimento forçado a um valor permitido pelas condições de superaquecimento e, a seguir, reduzida para o valor final durante a fase de homogeneização.

MODELO MATEMÁTICO

Posicionada sobre a soleira móvel do forno rotativo, a barra cilíndrica de aço entra em contato com a atmosfera do forno, uma composição de gases produzidas pela combustão entre 1100 e 1350 °C. Observa-se, então, o aquecimento da mesma através dos

processos de convecção e radiação entre os gases e a superfície da barra e por condução no contato onde se apóia na soleira, havendo transmissão de calor por condução da superfície para o núcleo.

O processo de transferência de calor responsável pelo aquecimento da barra se dá de forma transiente, ou seja, o perfil de temperatura varia ao longo do tempo, enquanto a barra caminha junto com a soleira do forno.

EQUAÇÃO DE GOVERNO NO INTERIOR DA BARRA

Segundo Machado (1989), a geração de energia relativa à oxidação do ferro na superfície da barra é compensada pelo aumento da resistência ao fluxo de calor devido à camada de óxido formada. A geração de energia decorrente das alterações físicas da estrutura do aço também pode ser desprezada, pois não há mudança de fase na faixa da temperatura de trabalho. Considerando-se as observações acima e a inexistência de transformações de energia de natureza elétrica, química ou nuclear, o termo de geração da equação é desconsiderado.

Supondo as condições do forno uniformes ao longo da direção horizontal transversal e desprezando os efeitos de extremidade devido à relação comprimento/diâmetro da barra (L/D > 10), teremos uma temperatura também uniforme na direção do comprimento da barra e, então, o problema pode ser tratado bidimensionalmente em coordenadas polares.

A equação da condução de calor em regime transiente no sistema de coordenadas polares r e ϕ pode ser escrita:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\, c\, T) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\, k \frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \phi}\left(k \frac{\partial T}{\partial \phi}\right) \qquad (1)$$

onde:

c = calor específico da barra de aço
ρ = massa específica da barra de aço
k = condutividade térmica da barra de aço

Como há uma simetria em relação ao plano ortogonal à seção da barra cilíndrica, trabalharemos com o domínio bidimensional correspondente à semi-circunferência, definida em coordenadas polares nos limites $0 \le r \le R$ e $0 \le \phi \le \pi$.

CONDIÇÃO INICIAL

Em $0 \le r \le R$ e $0 \le \phi \le \pi$ e $t = 0$, na entrada do forno, a temperatura da barra é uniforme, ou seja,

$$T(r, \phi, t) = T_o \qquad (2)$$

CONDIÇÕES DE CONTORNO

As trocas térmicas entre uma barra e sua vizinhança podem ser tratadas como:

- fluxo de calor resultante do processo de troca de calor por radiação da barra com as chamas luminosas, o gás, as barras vizinhas e as superfícies do forno;

- fluxo de calor resultante do processo de troca de calor por convecção da barra com o gás;

- fluxo de calor resultante do processo de troca de calor por condução com a soleira, pelas superfícies em contato.

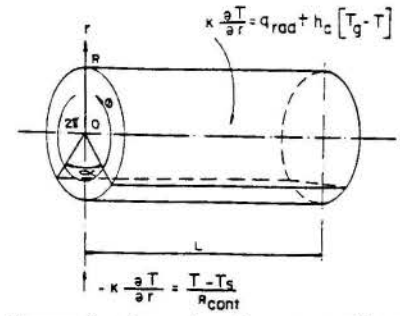


Figura. 3 - Trocas de calor entre a barra e o meio, sendo α a fração angular da barra em contato com a soleira.

Para análise das condições de contorno do problema, admite-se as seguintes hipóteses de simplificação:

- as trocas térmicas radiativas entre uma barra e as chamas luminosas não são consideradas, pois, conforme Heiligenstaedt (1971), o transporte de calor através de chamas luminosas é considerado em casos de temperaturas muito altas, para fornos com temperatura acima de 1700 °C e, para temperaturas menos elevadas, o cálculo mostra que pode-se desprezar a radiação da chama luminosa sem perda significativa da precisão;

- considera-se que numa mesma seção as paredes, teto e soleira do forno são assumidas como superfícies cinzentas a uma mesma temperatura;

- assumiu-se que o gás é um meio que não reflete e que a identidade de Kirchhoff pode ser aplicada para esta situação: $\alpha_G + \tau_G = 1 = \varepsilon_G + \tau_G$ (onde α_G, τ_G e ε_G são, respectivamente, a absortividade, a transmissividade e a emissividade do gás);

- segundo Smithells (1983), a emissividade do aço oxidado varia de 0,80 a 25° C a 0,79 a 600° C, tendo sido adotada como 0,8 neste trabalho.

Considerando-se as hipóteses acima e o domínio de solução definido, temos as seguintes condições de contorno:

1ª - Em $r = R$, $0 < \phi \le \frac{\alpha}{2}$, $t > 0$, tem-se a troca de calor por condução entre a barra e a soleira do forno.

Esta condição será expressa por:

$$-k\frac{\partial T(R,\phi,t)}{\partial r} = \frac{T(R,\phi,t) - T_s}{R_{cont}} \qquad (3)$$

onde a temperatura prescrita T_s é a temperatura da soleira e R_{cont} é a resistência de contato da interface barra/soleira. Para obtermos de R_{cont} fizemos o uso de uma das curvas apresentadas por Thomas (1965), aproximando o nosso caso de para o aço ferramenta e considerando o caso de deformação elástica, à temperatura ambiente:

$$R_{cont} = \frac{1}{(58{,}9785 + 59{,}0013.P_c)} \ \text{cm}^2.\text{K.W}^{-1} \qquad (4)$$

P_C é a pressão de contato e, para uma barra de diâmetro D, tem-se:

$$P_C = \frac{2 \cdot \pi \cdot D \cdot \rho}{\alpha} \qquad (5)$$

2ª - Em $r = R$, $\frac{\alpha}{2} < \phi < \pi$, $t > 0$, tem-se a troca de calor por radiação entre a superfície lateral da barra e as superfícies do forno que "enxergam" a barra e por radiação e convecção com o gás quente envolvente.

Esta condição será expressa através de uma condição de contorno de 3ª espécie:

$$k\frac{\partial T(R,\phi,t)}{\partial r} = q_{rad} + h_c\left[T(R,\phi,t) - T_g\right] \qquad (6)$$

onde,

q_{rad} = fluxo radiativo líquido entre a superfície lateral da barra e o gás e as superfícies das paredes laterais interna e externa e do teto do forno

h_c = coeficiente convectivo entre a barra e o gás

3ª - Em $\phi = 0$, $0 \le r \le R$, $t > 0$, o contorno corresponde a um segmento do eixo de simetria da barra e esta condição é expressa por:

$$\frac{\partial T(r,0,t)}{\partial r} = 0 \qquad (7)$$

4ª - Em $\phi = \pi$, $0 \le r \le R$, $t > 0$, o contorno corresponde a outro segmento do eixo de simetria da barra e esta condição é expressa por:

$$\frac{\partial T(r,\pi,t)}{\partial r} = 0 \qquad (8)$$

CÁLCULO DO FLUXO RADIANTE

Os gases são em muitos casos transparentes à radiação. Quando absorvem e emitem radiação, isto ocorre somente em uma faixa estreita de comprimento de onda.

O gás entre a superfície do forno e a carga contém moléculas como O_2 e N_2 que são transparentes à radiação, mas também contém moléculas como CO_2 e H_2O, que absorvem e refletem a radiação.

Para a representação do fluxo líquido de calor radiante, q_{rad}, será adotado o método de análise por circuitos proposto por Oppenheim (1956), conforme ilustrado na Figura 4.

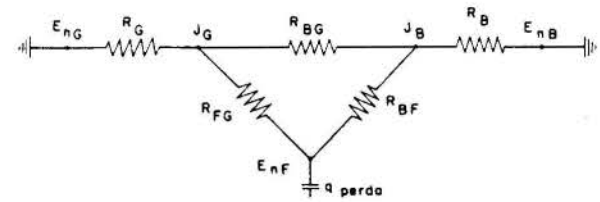


Figura 4 - Circuito analógico para a troca de calor entre dois meios separados por um gás

CÁLCULO DO FLUXO CONVECTIVO

O escoamento dos fumos pode ser representado esquematicamente:

sentido do →
movimento →
do gás →

barras

O O O O O ⇦ sentido do movimento das barras

Trata-se de um processo laminar de convecção forçada e obtemos o Número de Nusselts através da expressão de Zhukauskas (1972):

$$\overline{Nu}_{D(z)} = 0{,}26\, Re_{D(z)}^{0,6}\, Pr_{(z)}^{0,37} \qquad (9)$$

MÉTODO NUMÉRICO

A equação de governo e suas condições de contorno serão resolvidas utilizando-se o método de Diferenças Finitas com formulação em Volumes Finitos desenvolvido por Patankar (1972). Empregou-se o esquema de interpolação "*power-law*" nas direções r e ϕ e obteve-se a solução do sistema linear de equações algébricas pelo método linha por linha com correção por blocos proposto por Patankar (1981).

Foi elaborado um programa que contemplasse o modelamento desenvolvido e esse acopiado ao programa UNSTEAD, desenvolvido por Ziviani (1992), que resolve equações tridimensionais parabólicas usando o método implícito de interpolação na coordenada "*one way*".

Além disto foi desenvolvida uma subrotina denominada PROPFIS que estabelece os valores de k, ρ e c em função da temperatura e da qualidade do aço e outra denominada EMIGAS que calcula a emissividade do gás em função dos teores de CO_2 e H_20 e de sua temperatura.

Como o tempo é uma coordenada "one way", isto é, as condições em um instante só dependem da situação no instante anterior, obtém-se a solução da equação da energia transiente marchando-se no tempo desde uma dada distribuição inicial de temperatura. Então, em um típico *"time-step"* a sequência é: conhecendo-se um campo de temperaturas **T** no tempo **t**, encontra-se os novos valores de **T** no tempo **t + Δt** Os valores antigos (conhecidos) de **T** nos pontos nodais são denominados por T_P^o, T_E^o, T_W^o, T_S^o e T_N^o e os novos (desconhecidos) no tempo **t + Δt** por T_P, T_E, T_W, T_S e , T_N, onde os índices P, E, W, S e N representam os valores da temperatura na posição.

Como critério de convergência admitiu-se o balanço local de energia, com uma tolerância na ordem de 10^{-5}.

VALIDAÇÃO DO MODELO

Para o nosso caso, obtivemos informações sobre um ensaio realizado em um forno de soleira rotativa para aquecimento de barras redondas da laminação contínua de tubos da Mannesmann Röhren-Werke, em Mülheim, na Alemanha. O ensaio em questão foi realizado em Setembro/1993 pelo BFI-Betriebsforschungsinstitut de Düsseldorf, Alemanha, conceituada instituição de pesquisa associada à VDEh (Verein Deutscher Eisenhüttenleute = Associação dos Metalurgistas Alemães) - Institut für angewandte Forschung GmbH. A documentação é protocolada como Relatório Nr. V 1368.

Como o modelo proposto é flexível, não sendo específico para um determinado tipo de forno, foi possível a simulação do caso ensaiado na Mannesmann/Mülheim, comparando os dados obtidos com os dados experimentais , cujos resultados são apresentados na Figura 5 e na Tabela 1.

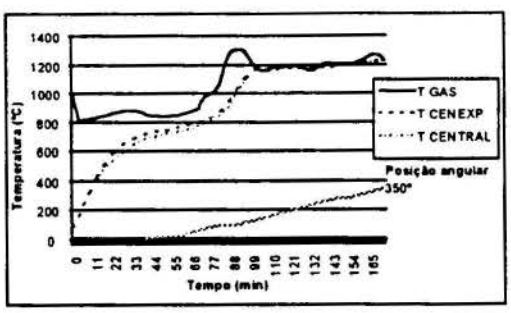


Figura 5 - Temperaturas do núcleo: resultados teóricos x dados experimentais

Tabela 1 - Desvios entre resultados do modelo e dados experimentais

Desvio	Centro da Barra
Absoluto máximo (°C)	50,2
Absoluto médio (°C)	16,7
Absoluto da temperatura de saída (°C)	1,8
Porcentagem de desvios < 5%	84,6
Porcentagem de desvios < 50 °C	98,8

Como podemos observar os resultados teóricos aproximam-se bastante dos dados experimentais, assegurando a validade do modelo. Os desvios mais acentuados são localizados na região de 600 a 700°C e podem ser explicados pela aproximação das propriedades físicas, cujos valores oscilam muito nesta região de transformação eutetóide dos aços.

Considerando-se os erros de medição na ordem de 2% (termopar e instrumentos), praticamente houve coincidência entre os dados medidos e o modelo a partir de 600 °C.

RESULTADOS OBTIDOS EM SIMULAÇÕES

A seguir são analisados os resultados obtidos em simulações efetuadas em diversas situações, onde foram variados os tempos de aquecimento, as temperaturas do forno e, ainda, situações onde não houve paradas durante o aquecimento da carga.

Para o desenvolvimento do trabalho de simulações, selecionamos situações possíveis de aquecimento de barras de aço carbono, grau B (0,18 a 0,21%C, 0,45 a 0,55% Mn e 0,20 a 0,30% Si), de diâmetro 170 mm e comprimento 1700 mm, com emissividade tomada como constante e igual a 0,8, que seriam enfornadas com a temperatura inicial de 25 °C no forno rotativo Brasimet 60 t/h, aquecidas a 1290 °C e posteriormente transformadas em tubos pelo processo de laminação contínua nas instalações da Usina Barreiro da Mannesmann SA. O gradiente de temperatura admissível, $\Delta T_{permitido}$ é 288 °C.

Nesta análise, considerando que não existam paradas durante a laminação, são simuladas três situações com diferentes tempos de forno e mesmas temperaturas de "*set-point*" das zonas.

Tabela 2 - Dados das simulações: grupos 1, 2 e 3 - Barras de aço carbono grau B, ϕ 170 mm, comprimento 1700 mm

Simulação	Temp. "set-point" das zonas (°C)					Tempo de Forno Padrão
	Zona 1	Zona 2	Zona 3	Zona 4	Zona 5	(min)
1	1260	1300	1300	1300	1290	61,6
2	1260	1300	1300	1300	1290	83,2
3	1260	1300	1300	1300	1290	124,0

Definindo *Tempo de Convergência* como o tempo de permanência da barra no forno até que o núcleo atinja a temperatura de aquecimento e *Exposição acima de 800 °C* como o tempo de permanência da barra no forno com temperatura superficial acima de 800 °C, tem-se a seguinte comparação para as simulações:

Tabela 3 - Comparação entre as simulações 1, 2 e 3

Simulação	Tempo de forno (min)	Convergência (min)	Exposição acima de 800 °C (min)	Temperatura Final (Núcleo) (°C)	ΔT_{max} na peça (°C)	Consumo específico kJ/kg
1	61,6	Não atingiu	21	1277	152	1304
2	83,2	75	62	1292	135	1361
3	124,0	84	97	1294	110	1437

Na *Simulação 1*, a barra seria desenfornada com temperatura inferior à temperatura de aquecimento, sinalizando, para estas condições de "*set-points*" de temperatura das zonas, que o tempo de forno é inferior à permanência mínima para atingir-se homogeneamente a temperatura de aquecimento. Na *Simulação 2* atinge-se a convergência próximo ao desenfornamento e a *Simulação 3* mostra folga no tempo de forno.

Nas três situações tem-se $\Delta T_{max} < \Delta T_{permitido}$, sendo que quanto menores as temperaturas de pré-aquecimento e de aquecimento, mais suave é o aquecimento e, consequentemente, menor é o valor de ΔT_{max}.

Nas condições de aquecimento da *Simulação 1* os gradientes de temperaturas na barra ao longo de todo o tempo de permanência são aceitáveis e são menores as perdas por oxidação e o consumo específico. No entanto, como a temperatura de aquecimento não é atingida, esta proposição não pode ser recomendada. Convém lembrar que o ritmo de trabalho deve ser determinado pela capacidade do processo de laminação, sendo que o forno deve abranger com folga os máximos limites do equipamento. Na *Simulação 2* há uma coincidência com a produtividade nominal do laminador e como os resultados são bastante razoáveis pode-se optar com segurança por estas condições de aquecimento.

Os perfis de temperatura mostram que na fase inicial a temperatura da superfície inferior (chamada *face fria* por causa do efeito do contato com a soleira) fica pouco acima da temperatura do núcleo e bem abaixo da temperatura da superfície superior (chamada *face quente*, totalmente exposta ao meio). Na *Simulação 1* as temperaturas na barra não se equalizam, mas nas outras duas simulações chega-se uniformemente ao desenfornamento, sendo a temperatura da superfície inferior ligeiramente mais baixa (1 a 2 °C). Os gra- dientes entre face fria e núcleo são menores que os da face quente em relação ao núcleo. Em ambos os casos estes gradien- tes são mais acentuados na fase que anteriormente definimos como *aquecimento*. As isotermas mostram que quanto mais tempo de enfornamento menor a influência da soleira no processo.

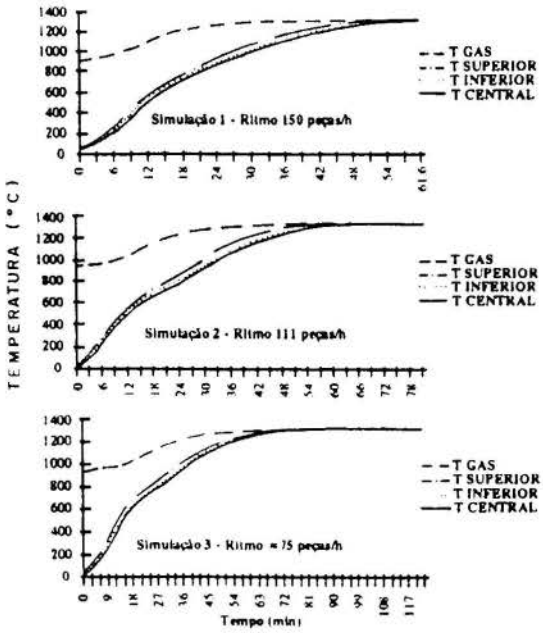


Figura 6 - Perfis de temperatura x tempo

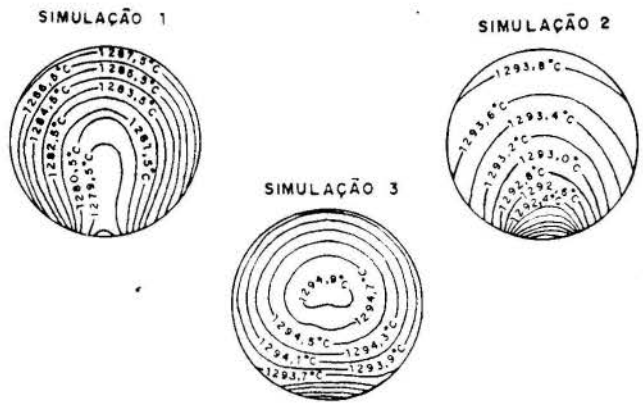


Figura 7 - Isotermas da barra no desenfornamento

CONCLUSÃO

O modelo elaborado é flexível, podendo ser usado para fornos rotativos com diferentes dimensões e divisões de zonas de controle e permite que seja variado o tipo de gás combustível, o diâmetro, o comprimento e a qualidade da barra de aço.

A partir de simulações através do modelo, pode-se chegar à uma curva ideal de aquecimento de produtos a serem laminados, objetivo maior deste trabalho, para estabelecimento de parâmetro operativos como "*set-points*" de temperaturas das zonas do forno, ritmo de operação e estratégias para as paradas para cada programa de laminação, visando atingir o final de aquecimento com qualidade no que se refere à geração de carepa, à diminuição da descarbonetação e superaquecimentos, evitando queima ou desuniformidade de aquecimento, que por sua vez levam a variações de parede ou outros defeitos durante a laminação. O consumo teórico de combustível pode ser comparado com o real, servindo como instrumento para o gerenciamento em relação aos custos de energia.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Heiligenstaedt, W., 1971, "Thermique Apliqueé aux Fours Industriels", Dunod, Paris, Vol. 1 e 2.

Machado, A. C., 1989, "Análise Numérica da Transferência de Calor numa Tira de Aço Submetida a Aquecimento em Forno Contínuo", Tese de Mestrado, Departamento de Engenharia Mecânica da PUC, Rio de Janeiro.

Oppenheim, A. K., 1956, "Transaction ASME", Vol. 65, pp. 725-726.

Patankar, S.V., 1972, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, New York.

Patankar, S.V., 1981, "A Calculation Procedure for Two Dimensional Elliptic Situations", Numerical Heat Transfer, Vol. 4, pp. 409-425

Schulte M. e Klima R., 1993, Ermittlung der Erwärmungsverlaufes von Werkstücken in Wärm -und Wärmebehandlungsöfen, Drehherdofen, RKS-W, MRW - Mülheim", Betriebsforchungsinstitut (BFI), Düsseldorf, relatório número V 1368.

Smithells C. J., 1983, "Smithells Metals Reference Book", Robert Hartnoll Ltd, Bodmin, Cornwall.

Thomas T. R. e Probert S. D., 1965, "Thermal Resistances of Some Multilayers Contacts under Static Loads", J. Heat Mass Transfer, Vol. 9, pp. 739-754.

Zhukauskas, 1972,"Heat Transfer from Tubes in Cross Flow", J. P. Hartnett and T. F. Irvine, Jr., Ed. Advances Heat Transfer, Vol.8, Academic Press, New York.

Ziviani, M., 1992, "Programa Unstead - Solução Numérica de Equações Tridimensionais Parabólicas", Nota Teórica não Publicada, Engenharia Mecânica, UFMG, Belo Horizonte.

ABSTRACT

The mathematical modelling of re-heating for rolling of steel cylindrical bars in rotary-hearth furnaces involves conduction, convection and thermal radiation simultaneously, resulting in a system of second partial degree diferential equations. In a solution of the governing equations, the finite difference method was addopted with formulation in control volume. The operational parameters - furnace timing and setpoint temperatures of the zones - was studied as a function of dimentions and number of furnace zones, the type of fuel used and steel specification and gauge, for the evaluation of the results in relation to the heating quality and energy comsumption. The model applies to the delay times when the production rate is zero, allowing for simulation of strategies for reduction of energy consumption, of oxidation losses an of overheating risks.

ABCM

VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL DE MODELO SIMPLIFICADO DE CALDEIRAS DOMÉSTICAS A COMBUSTÍVEL LÍQUIDO

Jaime R. T. Rios[(1)], Oscar S. Hernandez[(2)]
(1) Departamento de Técnicas Fundamentais - Escola de Minas
Universidade Federal de Ouro Preto - 35400-000 - Ouro Preto - MG
(2) Departamento de Engenharia Mecânica
Universidade Federal de Uberlândia - 38400-206 - Uberlândia - MG

SUMÁRIO

O "Toolkit for Primary HVAC - System Energy Calculation" apresenta um conjunto de modelos de sistemas térmicos que permitem avaliar a performance de sistemas HVAC. O objetivo deste trabalho consiste na validação do modelo de caldeiras a combustível líquido, proposto pelo "Toolkit", a partir de dados experimentais obtidos na caldeira do Laboratório de Termodinâmica da Universidade de Liège (Bélgica). Faz-se a identificação dos parâmetros da caldeira (coeficientes de transferência de calor gás-água e água-ambiente), e compara-se estes valores, obtidos através dos ensaios com aqueles identificados pelo "Toolkit". Através da análise de resultados, discute-se a validação do modelo proposto pelo "Toolkit" e apresenta-se as correções necessárias dos coeficientes de transferência de calor.

INTRODUÇÃO

O presente trabalho tem por objetivo, validar um modelo simplificado de caldeira, proposto por Lebrun et al (1994) e publicado pela ASHRAE no documento TC.4.7. A validação foi realizada utilizando uma caldeira industrial de uso doméstico, fabricada na Itália, e é importante devido à simplicidade do modelo, que simula a caldeira considerando-a como um conjunto de trocadores de calor: ar-água (we), água-gases de combustão (gw) e uma câmara de combustão adiabática (CC).

O modelo exige a identificação de dois coeficientes de troca de calor (AU_{we}) e (AU_{gw}) que correspondem, respectivamente, aos dois trocadores de calor acima citados. Estes coeficientes podem ser, segundo o modelo, identificados em base a informações dos catálogos dos fabricantes. Nosso trabalho consiste na identificação dos parâmetros com relação a ensaios experimentais, fazendo comentários a respeito dos dados obtidos.

BANCO DE ENSAIOS

O banco de ensaios utilizado é mostrado esquematicamente na figura 1, consiste de uma caldeira doméstica industrial, um circuito de água de alimentação, um circuito de combustível e um circuito de gases de combustão. A bancada foi instrumentada de modo a fornecer as propriedades medidas nos pontos indicados na figura 1.

A caldeira testada tem uma potência nominal de 370 kW, capacidade de armazenamento de 720 litros de água, e apresenta dois blocos: um inferior contendo a câmara de combustão e outro superior, contendo o trocador de calor gases de combustão (g)-água(w). A caldeira testada possui janelas de quartzo na câmara de combustão para facilitar estudos de espectroscopia de chama (figura 2). O combustível utilizado foi o "óleo Diesel". A caldeira testada, mostrada esquematicamente na figura 2, foi devidamente instrumentada e cujos pontos de medida são mostrados na figura 1 (banco de ensaio). Foram utilizados nas medidas fluxômetros do

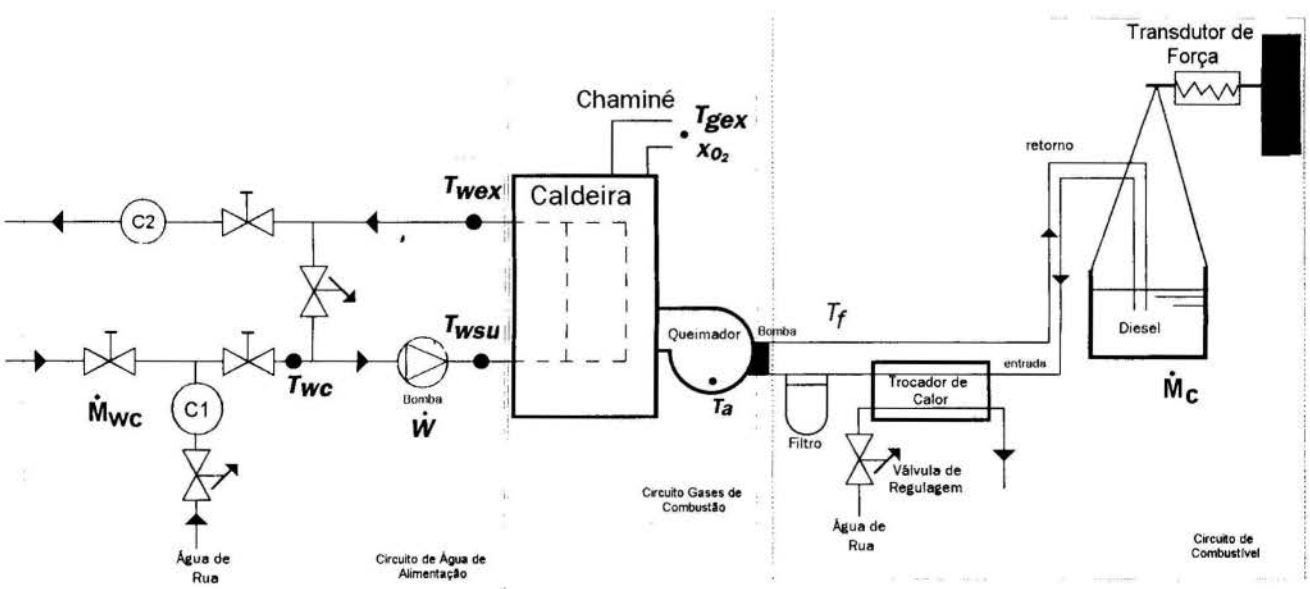


Figura 1 - Banco de ensaio da caldeira doméstica

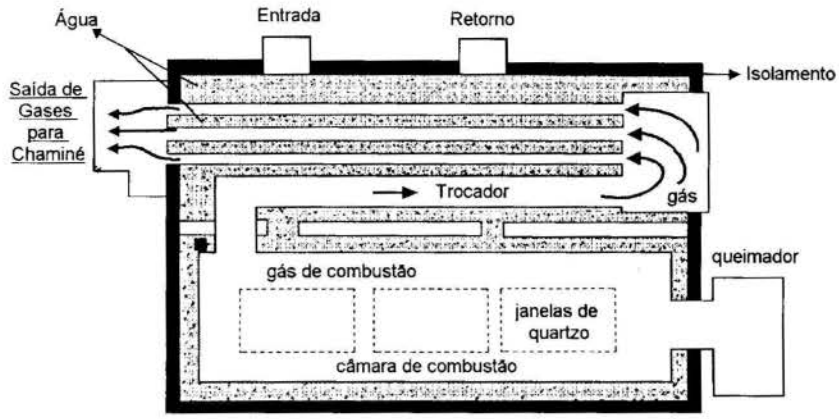


Figura 2 - Representação esquemática da caldeira

tipo turbina, precisão 3-5%; analisador de gases de combustão clássico, termopares tipo T (tolerância 0,1 °C) e tipo S com 10 % Rh e tolerância 1 (1,6 °C).

MODELO DE CALDEIRA PROPOSTO (Lebrun et al. 1994)

O modelo proposto, mostrado esquematicamente na figura 3, contém três componentes: uma câmara de combustão (CC), um trocador de calor gases de combustão-água (HEX1) e um trocador de calor água-ambiente (HEX2).

O modelo em regime permanente considera processo de combustão na câmara (CC) adiabático e estequiométrico e. os trocadores de calor HEX1 e HEX2 são do tipo contra-corrente. Para utilizar o modelo é necessário conhecer ao menos um ensaio em regime permanente ou dados equivalentes, fornecidos por catálogos de fabricantes de caldeiras, para identificar o coeficiente de troca de calor "AU_{we}" água-ambiente, e posteriormente identificar o coeficiente gás-água, "AU_{gw}".

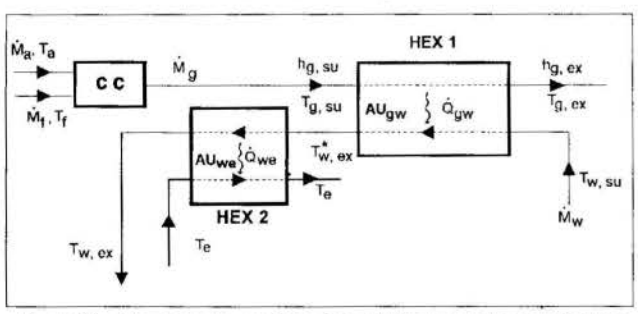


Figura 3 - Esquema do modelo de caldeira proposto por Lebrun et al (1994).

O modelo utilisa a equação abaixo para calcular o coeficiente AU_{we}:

$$AU_{we} = 4{,}1234 + 0{,}0667\text{x}10^{-3}\dot{Q}_{use} - 3{,}586\text{x}10^{-4}\dot{Q}_{use}^2 \qquad (1)$$

onde Q_{use} é a potência calorífica (kW).

A eq. (1) foi obtida tendo como base a análise de inúmeras experiências realizadas nos últimos 20 anos no LT da ULg, com caldeiras domésticas industriais.

Os dados necessários para identificar AU_{gw} são: relação ar-combustível (f) ou a fração molar de CO_2 ou de O_2 (x_{CO2}, x_{O2}) dos gases de combustão, vazão mássica de combustível ($\dot{m}_f$), temperatura ambiente (T_e), temperatura do combustível (T_f), vazão

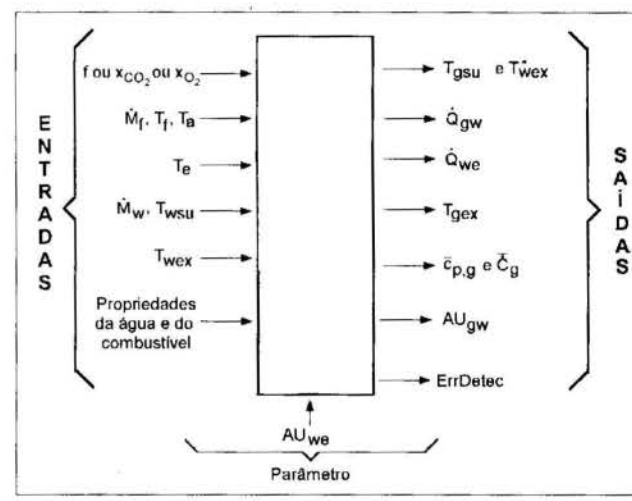


Figura 4 - Esquema da sub-rotina utilizada para identificar AU_{gw}, chamada "BOILERID" no modelo proposto.

mássica de água ($\dot{m}_w$), temperatura da água de entrada(T_{wsu}), coeficiente AU_{we}, temperatura da água de saída (T_{wex}) (figura 4).

O coeficiente de transferência de calor gás-água (AU_{gw}) para a caldeira utilizada, foi identificado de acordo com a metodologia proposta por Lebrun et al. (1994) para um ensaio considerado como referência. O modelo propõe a equação (2) para calcular o AU_{gw} para condições diferentes das de referência. Para a caldeira testada o coeficiente de referência identificado segundo procedimento do TC.4.7 foi 473,31W.K^{-1}.

$$AU_{gw} = AU_{gwR}\left(\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_{fR}}\right)^{0,65} \qquad (2)$$

METODOLOGIA DE TESTES

Foram analisados 12 ensaios, 6 com dois *gicleurs* e 6 com um *gicleur*, em cada ensaio foi mantida a pressão de injeção de combustível constante, variando o excesso de ar e medindo as temperaturas, fluxos de massa e demais parâmetros indicados na figura 1. Com os parâmetros medidos foi possível identificar os coeficientes AU_{we} e AU_{gw}, através da sub-rotina *BOILERID* fornecida no documento ASHRAE TC 4.7 e, em seguida, utilizando-se a subrotina *BOILERSS* (também disponível no mesmo documento) foi possível obter por simulação $\dot{Q}_{gw}$, $\dot{Q}_{we}$, $\dot{Q}_{use}$ e η.

ANÁLISE DOS DADOS EXPERIMENTAIS

A partir dos parâmetros experimentais medidos, foi analisado o processo de combustão e realizado um balanço térmico da caldeira, os resultados são apresentados com detalhes por Rios (1995).

A potência calorífica cedida à água pelos gases de combustão $(\dot{Q}_{gw})$ é igual a perda de entalpia dos gases de combustão menos a perda de potência calorífica através das janelas de quartzo como mostra a equação (3).

$$\dot{Q}_{gw} = \dot{m}\bar{c}_{pg}\left(T_{gsu} - T_{gex}\right) - \dot{Q}_{fen} \tag{3}$$

O fluxo de combustível é calculado utilizando a equação (4), onde "f" é a relação ar-combustível utilizada nos testes.

$$\dot{m} = \dot{m}_f\left(1 + 1/f\right) \tag{4}$$

O calor específico médio dos gases de combustão foi obtido por:

$$\bar{c}_{pg} = \left(\frac{h_{gsu} - h_{gex}}{T_{gsu} - T_{gex}}\right) \tag{5}$$

onde, h_{gsu}, h_{gex} são as entalpias dos gases de combustão na entrada e na saída do trocador da caldeira, respectivamente, e T_{gsu}, T_{gex} as temperaturas dos gases de combustão na entrada e saída do trocador, respectivamente.

As entalpias h_{gsu} e h_{gex} foram calculadas da seguinte forma:

$$h_{gsu} = \frac{h_{Tgsu}}{\left(1 + 1/f\right)} \tag{6}$$

onde,

$$h_{Tgsu} = \left(n.h_{Tad}\right)_{CO_2} + \left(nh_{Tad}\right)_{H_2O} + \left(nh_{Tad}\right)_{O_2} + \left(nh_{Tad}\right)_{H_2} \tag{7}$$

onde, n é o número de moles dos componentes dos gases de combustão; e T_{ad} a temperatura adiabática de chama

$$h_{gex} = \frac{h^*_{Tgex}}{\left(1 + 1/f\right)} \tag{8}$$

onde,

$$h^*_{Tgex} = \left(nh_{Tgex}\right)_{CO_2} + \left(nh_{Tgex}\right)_{H_2O} + \left(nh_{Tgex}\right)_{O_2} + \left(nh_{Tgex}\right)_{N_2} \tag{9}$$

O coeficiente AU_{gw} foi estimado experimentalmente considerando o trocador de calor HEX1 como um trocador de calor contracorrente.

$$(DMTL)_{gw} = \frac{\left(T_{gsu} - T_{wex}\right) - \left(T_{gex} - T_{wsu}\right)}{\ln\left(\frac{T_{gsu} - T_{wex}}{T_{gex} - T_{wsu}}\right)} \tag{10}$$

Assim,

$$AU_{gw} = \frac{\dot{Q}_{gw}}{(DTLM)_{gw}} \tag{11}$$

Para avaliar AU_{we} foi considerado que a água como elemento de maior capacidade térmica representaria a caldeira no processo de troca de calor com o ambiente, assim o calor perdido para o ambiente será a diferença entre a potência calorífica liberada na combustão $(\dot{Q}_c)$, menos a potência calorífica perdida através das janelas $(\dot{Q}_{fen})$ menos a potência calorífica líquida cedida à água $(\dot{Q}_{use})$, como mostrado na equação (13)

$$AU_{we} = \frac{\dot{Q}_{perdas}}{(DTLM)_{we}} \tag{12}$$

onde,

$$\dot{Q}_{perdas} = (\dot{Q}_c - \dot{Q}_{fen}) - \dot{Q}_{use} \tag{13}$$

Além disso, considera-se o bloco da caldeira como um trocador de calor contracorrente atuando com o ar ambiente (T_e)

$$(DTLM)_{we} = \frac{\left(T^*_{wex} - T_e\right) - \left(T_{wex} - T_e\right)}{\ln\left(\frac{T^*_{wex} - T_e}{T_{wex} - T_e}\right)} \tag{14}$$

onde, T^*_{wex} é a temperatura da água na saída da caldeira, calculada pela equação (15).

$$T^*_{wex} = \frac{\dot{Q}_{gw}}{\dot{Q}_{wsu}} + T_{wsu} \tag{15}$$

onde: $\dot{Q}_{gw}$ é a potência calorífica cedida pelos gases à água no trocador HEX1 e $\dot{C}_{wsu}$ é calculado como definido pela equação (16)

$$\dot{C}_{wsu} = \dot{m}_{wsu}c_w \tag{16}$$

onde c_w é o calor específico da água.

ANÁLISE DE RESULTADOS

As figuras 5 e 6 apresentam as evoluções de T_{gex}, $\dot{Q}_{gw}$ e AU_{gw} obtidos através de balanços térmicos utilizando dados experimentais (ex: BT), e utilizando o programa do modelo fornecido pelo TC.47, para os casos de um *gicleur* (figura 5) e de dois *gicleurs* (figura 6).

Observa-se que AU_{gwBT} varia proporcionalmente com o excesso de ar, enquanto que o AU_{gwTK} permanece constante. O comportamento observado de AU_{gwTK} é devido a que modelo não considera o efeito do excesso de ar e sim o fluxo de combustível (equação 12), e a potência nominal da caldeira. Observamos também que T_{gexBT} e T_{gexTK} tem o mesmo comportamento dos coeficientes de troca de calor experimentais e obtidos pelo modelo. Da análise dos resultados obtidos podemos dizer que os efeitos convectivos causados pelo aumento do excesso de ar na combustão, assim como a mudança na temperatura adiabática de chama (T_{ad}) (Rios, 1995), afetam consideravelmente a modelagem da caldeira,

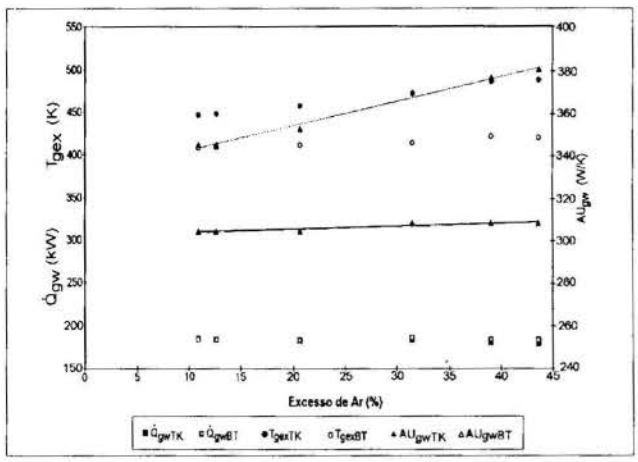


Figura 5 - Evolução de $\dot{Q}_{gw}$, T_{gex}, AU_{gw} para BT e TK, com relação ao excesso de ar, utilizando um *gicleur* (baixa potência)

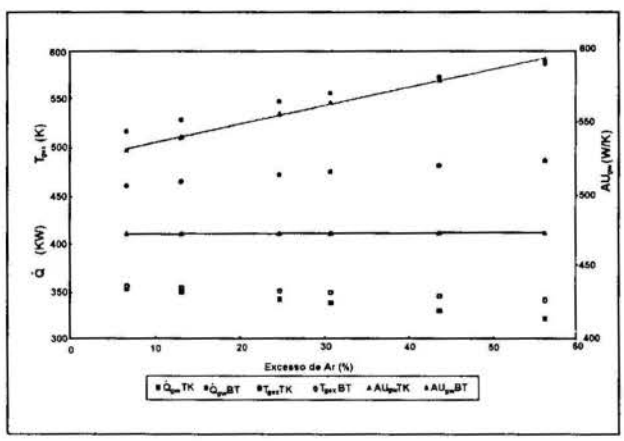


Figura 6 - Evolução de $\dot{Q}_{gw}$, T_{gex}, e AU_{gw} para BT e TK, com relação ao excesso de ar, utilizando dois *gicleurs* (alta potência).

e nisto o modelo proposto no "Toolkit" da ASHRAE fica um pouco comprometido (erros de 2 a 8 % aumentando com o excesso de ar).

RECOMENDAÇÕES SUGERIDAS PARA MELHORAR A PRECISÃO DO MODELO

Sugerimos considerar a influência do excesso de ar no cálculo do AU_{gwTK}, como se segue:

$$AU_{gwTKC} = AU_{gwTK}(A.e + B) \tag{17}$$

onde, AU_{gwTKC} é o coeficiente corrigido, e é o excesso de ar e A e B são constantes.

A equação resultante para a caldeira analisada seria:

$$AU_{gwTKC} = AU_{gwTK}\left(3{,}2465x10^{-3}e + 1{,}0932\right) \tag{18}$$

Fazendo a correção sugerida, as diferenças entre T_{gexBT} e T_{gexTK} oscilam de 0,1 a 0,6%.

CONCLUSÕES

Os estudos realizados mostraram que os coeficientes AU_{gw} e AU_{we} não são somente função da potência nominal da caldeira, mas também do excesso de ar e que a correção dos coeficientes como sugerido no trabalho melhora a precisão do modelo na obtenção de T_{gex} e $\dot{Q}_{gw}$. É desejável obter uma forma de corrigir AU_{gw} similar a recomendada no modelo (ver eq. 2), onde seja levado em conta o excesso de ar, para a obtenção dos valores de AU_{gw} para diferentes condições de operação, ponto este a ser explorado num trabalho futuro pelos autores.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Lebrun, J., Bourdouxhe,J.P. e Grodent, M., 1994, "HVAC1KIT- A Toolkit for Primary HVAC System Energy Calculation", prepared for ASHRAE, TC 4.7 Energy Calculation, Universidade de Liège, Bélgica.

Rios, J.R.T., 1995, "Validation Experimentale du Modele Thermique de Chaudières a Combustible Liquide proposé dans le Toolkit", Tese de Mestrado, Universidade de Liège, Bélgica.

ABSTRACT

The "Toolkit for Primary HVAC - System Energy Calculation" presents a set of thermal systems models for evaluation of the HVAC systems. The purpose of this work is to validate the model of liquid fuel boiler provided by the "Toolkit", by means of experimental data from the boiler of the Thermodynamic Laboratory of the University of Liège (Belgium). The parameters of the boiler (coeficient of heat transfer gas-water and water-environment) are identified and compared with those identified by "Toolkit" Analysing the results, the necessary corrections for the parameters are presented.

ABCM

ESTUDIO DEL PROCESO DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN COCINAS A BRIQUETAS DE CARBON

Estela de la Gracia Assureira E.
Proyecto Carbón - Departamento de Ingeniería
Pontificia Universidad Católica del Perú
Apartado 1761 Lima 1 Perú

SUMARIO

Se investigó la influencia de la relación existente entre el diámetro de la briqueta (Db), el diámetro de la olla (Do) y la distancia olla-briqueta (H) con la finalidad de optimizar el uso de la energía en cocinas a briquetas. Los experimentos se realizaron en cocinas metálicas portables de una hornilla. El combustible empleado fue briquetas de carbón antracítico. Se aplicó el Test de Ebullición y el Balance de Energía y se analizó los procesos de transferencia de calor. Para facilitar el encendido se desarrolló un producto empleando cisco de carbón vegetal.

INTRODUCCION

El Perú posee reservas de carbón mineral que sobrepasa los 1372 millones de toneladas y que representan el 6% del potencial energético y alrededor del 1% del consumo (Sammané Boggio M., 1992).

Los más importantes yacimientos se encuentran en las cuencas del Alto Chicama en el norte, Santa, Oyón y Jatunhuasi en la región central del país. El carbón más abundante es del tipo antracítico (75% del total existente), aunque también existen reservas del tipo semi-antracítico, bituminoso y lignito.

En la década de los 80, con la finalidad de introducir el empleo del carbón como alternativa energética económica, la Pontificia Universidad Católica del Perú dio inicio al Proyecto Carbón promoviendo el empleo del carbón bajo la forma de Briquetas en las ciudades de Huaraz y Lima, siendo el mercado escogido el familiar urbano marginal.

La masificación del empleo del carbón en el Perú ocurrida en los cuatro últimos años, condujo a evaluar la situación existente. El resultado de esta evaluación mostró que era necesario optimizar la energía generada por las briquetas así como facilitar su encendido y reducir las emisiones contaminantes.

Se planteó entonces como trabajo estudiar la influencia de las relaciones geométricas olla-briqueta en el funcionamiento de las cocinas a briquetas y el desarrollo de un "encendedor o prendedor de briqueta" . Este reporte presenta los resultados de los trabajos realizados.

COMBUSTIBLE, EQUIPOS, INSTRUMENTOS EMPLEADOS

Combustible . Se ha empleado como combustible Briquetas de Carbón, una mezcla compacta de partículas de carbón antracítico, arcilla y cal, de forma cilíndrica, con agujeros para facilitar la combustión. La Tabla 1 se presenta los resultados del Análisis del Carbón empleado y las características de las briquetas de carbón utilizadas.

Equipos . Las pruebas se realizaron en dos cocinas portátiles metálicas de una hornilla, sin chimenea modelos AE005H y AE002D, empleando en cada caso una briqueta por hornilla, ver Tabla 2. En el modelo AE005H (Figura 1) se empleó como aislante una capa de 45mm de fibra de vidrio y 40 mm de colchón de aire mientras que en el modelo AE002D (Figura 2) se empleó una capa de 50mm de ceniza como material aislante. En ambos casos, el material de la cámara de combustión fue ladrillo refractario, clase sílico-aluminoso.

Tabla 1 - Briquetas de Carbón y Análisis del Carbón

Código de la Briqueta		BC-02	BC-04
Diámetro (mm)		150	80
Altura (mm)		75	100
Peso (N)		17.2	5.9
Número de agujeros		22	9
Diámetro del agujero (mm)		12	12
Duración (horas)		3	2.5
Composición			
• arcilla	+ 1000 μm	8.00%	8.52%
	+ 250 a -1000μm	12.00%	12.78%
• carbón	+ 2830 μm	16.00%	14.90%
	+ 2000 a -2830 μm	24.00%	22.35%
	+ 1410 a -2000 μm	40.00%	37.25%
• cal	- 1000 μm	0.00%	4.20%
Energía para encender (kJoule)		9,280	2,400
Caracteristicas del Carbón			
Poder Calorífico (PC) kJ/kg		22350	25510
Carbono Fijo (C)		57.99 %	66.60%
Ceniza		32.71 %	24.72%
Materia Volátil (MV)		4.12 %	4.42%
Humedad		5.18 %	4.26%
Azufre (S)		0.38 %	2.33%

Tabla 2 - Cocinas Portátiles

Modelo de cocina	AE002D	AE005H
Briqueta	BC-02	BC-04
Diámetro de hornilla (mm)	150	90
Cámara de combustión - altura (mm)	300	260
Cámara de combustión - diámetro (mm)	160	90

Los modelos ensayados AE002D y AE005H representan los modelos de cocinas portátiles más difundidos en las zonas urbomarginales de la ciudad de Lima

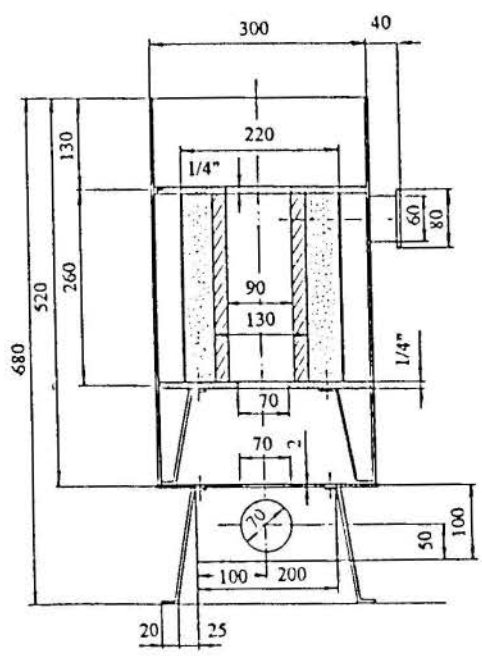
Los ensayos se realizaron empleando ollas de aluminio de diferentes dimensiones, la Tabla 3 describen a continuación sus características.

Tabla 3 - Características de las ollas

Código	26	22	18
Diámetro (mm)	260	220	180
Altura (mm)	170	140	120
Espesor (mm)	3	3	3

Instrumentos. Para medir la temperatura del agua a emplear en los ensayos se usaron termómetros de vidrio, escala de 20°C a 110°C, mientras que para el registro de la temperatura de las paredes y gases de combustión se usaron termocuplas tipo K y J. También fueron empleadas una balanza de 0 a 10 kg y un cronómetro.

Los registros de humedad, latitud y altitud fueron proporcionados por la Estación Meterológica Hipólito Unanue , localizada en el Campus Universitario.



A Revestimiento metálico exterior
B Cilindro refractario
C Relleno aislante, fibra de vidrio
D Revestimiento metálico intermedio
E Soportes interiores
F Soportes exteriores
G Entrada de aire

Figura 1 - Cocina modelo AE005H

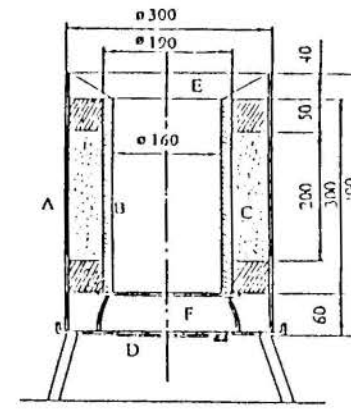
PROCEDIMIENTO DE ENSAYO

Con el objetivo de evaluar el rendimiento de las cocinas se hicieron ensayos para determinar el tiempo de ebullición, el consumo de combustible y la temperatura de las superficies de la olla, cocina así como la temperatura de los gases de combustión.

Para analizar la influencia de las relaciones geométricas olla-briqueta se trabajó con diversos tamaños de briquetas y ollas así como variando la distancia olla briqueta.

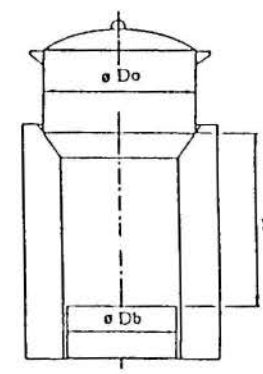
Con la finalidad de reducir el número de ensayos, comparar diferentes modelos y lograr una mejor comprensión de los mecanismos de transferencia de calor involucrados, las variables "Db" (diámetro de briqueta), "Do" (diámetro de la olla) y "H" (distancia entre la base de la olla y la briqueta) fueron combinadas como relaciones adimensionales Db/Do y H/Db.

La Figura 3 esquematiza la disposición de los elementos mencionados.



A Revestimiento metálico exterior
B Cilindro refractario
C Relleno aislante , ceiza
D Entrada de aire regulable
E Soporte de la olla, arcilla modelada
F Soportes interiores

Figura 2- Cocina modelo AE002D



Do Diámetro de la olla
Db Diámetro de la briqueta
H Distancia briqueta - olla

Figura 3 - Configuración

PRUEBAS DE EVALUACIÓN

El funcionamiento de la cocina fue analizado aplicando el Test de Ebullición (De Lepeleire et al., 1980) y el Balance de Energía.

Balance del Flujo de Energía. Cuando la briqueta de carbón combustiona libera energía ($\dot{Q}b$) parte de la cual es absorvida por el agua ($\dot{Q}ag$), el resto de la energía se lo llevan los gases de combustión (Qg) y el resto se pierde por radiación y convección a través de las paredes y base de la cocina ($\dot{Q}p,cc$) así como las paredes y tapa de la olla ($\dot{Q}p,ol$).

El flujo de calor por unidad de tiempo correspondiente a cada modelo ensayado se presenta en la Ec. 1.

$$\dot{Q}b = \dot{Q}ag + \dot{Q}g + \dot{Q}p,cc + \dot{Q}p,ol \qquad (1)$$

La Figura 4 presenta el Diagrama de Sankey

El Test de Ebullición. Este ensayo tiene como objetivos: determinar la eficiencia de la cocina (η), evaluar el consumo específico (SC) y el tiempo requerido (teb) para llevar a ebullición una determinada cantidad de agua.

Los ensayos fueron realizados para una carga de 2 kg de agua (mag) procediéndose a registrar la masa evaporada (mev), su temperatura inicial (To), así como su temperatura de ebullición (Tb), el consumo de combustible (mc) y el tiempo de ebullición (teb).

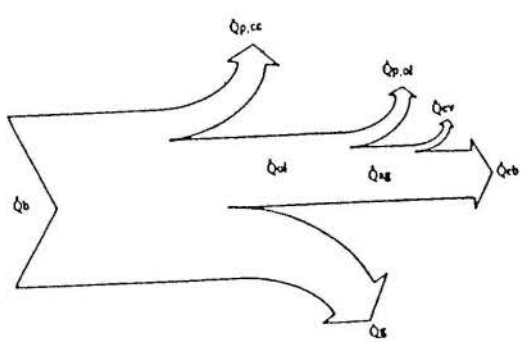


Figura 4 - Diagrama de Sankey

Flujo de Calor Generado por la Briqueta. En los ensayos, el flujo de calor por unidad de tiempo generado por la briqueta se estimó mediante la Ec. 2, en la que el término "PC" representa el poder calorífico del combustible.

$$\dot{Q}b = \frac{mc \,.\, PC}{teb} \qquad (2)$$

Flujo de Calor Requerido por el Agua. Se puede evaluar mediante la Ec. 3

$$\dot{Q}ag = \left[\frac{mag\ Cpa\ (Tb - To) + mev\ L}{teb} \right] \qquad (3)$$

En la ecuación anterior, e término "L" representa el calor latente de vaporización mientras que el término "Cpa" representa el calor específico del agua.

La Eficiencia de la Cocina (η). Se define como el flujo de energía requerida por el agua ($\dot{Q}ag$) para la ebullición respecto al flujo de energía entregado por la briqueta ($\dot{Q}b$), la Ec. 4 presenta esta relación.

$$\eta = \frac{\dot{Q}ag}{\dot{Q}b} * 100\% \qquad (4)$$

El consumo específico (SC). Se define como la masa de combustible requerido para llevar a ebullición una determinada cantidad de agua y se evalua mediante la Ec. 5

$$SC = \frac{mc}{mag} * 100\ \% \qquad (5)$$

Pérdidas en la cocina y en la olla. Debido a la temperatura de las superficies externas a la que se hallan la olla y la cocina, se producen pérdidas de energía por convección (Qp,con) y radiación (Qp,rad).

$$\dot{Q}p,ol = \dot{Q}p,con\text{-}ol + \dot{Q}p,rad,ol \qquad (6)$$

En la Ec. 6, "$\dot{Q}p,ol$" representa las pérdidas a través de la pared y la tapa de la olla debidas a la convección (Qp,con-ol) y a la radiación ($\dot{Q}p,rad\text{-}ol$)

$$\dot{Q}p,cc = \dot{Q}p,con\text{-}cc + \dot{Q}p,rad,cc \qquad (7)$$

En la Ec. 7, "Qp,cc" representa las pérdidas en la cocina, las cuales son debidas a la convección (Qp,con-cc) y a la radiación (Qp,rad-cc) a través de la pared y la base.

Pérdidas por Convección. Para el cálculo de las pérdidas por convección (Qp,con) a través de las superficies de la olla y de la cocina se ha empleado la Ec. 8.

$$\dot{Q}p,con = \alpha\, A\, (T_w - T_{amb}) \qquad (8)$$

En la Ec. 8, el símbolo "A" representa el área de la superficie de transferencia (pared de olla, tapa de la olla, pared de la cocina y base de la cocina), el término "T_w" es la temperatura de la respectiva superficie y "T_{amb}" representa la temperatura ambiente.

El coeficiente de película "α" correspondiente a las superficies de la olla y de la cocina se evaluó mediante las Ec. 9.

$$\alpha = \frac{(\lambda)\, Nu}{Leq} \qquad (9)$$

Como se puede apreciar en la Ec. 9 , el valor del coeficiente de convección depende del valor del número de Nusselt (Nu), de la conductividad térmica del fluido (λ), y de una característica geométrica del objeto (Leq).

Según Ozisik (1985), el valor del número de Nusselt correspondiente a la pared y base de la cocina así como a la tapa de la olla, se estimó mediante la correlación experimental mostrada en la Ec. 10.

$$Nu = C\, (Pr \,.\, Gr)^n \qquad (10)$$

En la ecuación mostrada, el término "Gr" representa el número de Grashof mientas que el término "Pr" representa el número de Prandtl. Los números adimensionales de Prandtl y Grashof deben ser evaluados para la temperatura de película (T_f) la cual se determina con el promedio de las temperaturas de superficie y la.

temperatura del ambiente. Los valores de las constantes "C" y "n" se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4 - Valores de los coeficientes C y n

Caso	C	n
tapa de la olla	0.15	0.33
pared lateral de la olla	0.59	0.25
base de la cocina	0.27	0.25

Para evaluar el coeficiente de película correspondiente a la pared lateral de la cocina se aplicó la Ec. 11 (ibid)

$$\alpha = \frac{1.42 \left| T_w - T_{amb} \right|^{0.25}}{Leq} \qquad (11)$$

Pérdidas por Radiación . Según Holman (1990), las pérdidas de energía por unidad de tiempo por radiación a través de las superficies de la olla y de la cocina ($\dot{Q}p,rad$) fueron evaluadas mediante la Ec. 12 . El valor de emisividad (e) considerado para el trabajo fue 0.45, la constante de Stefan Boltzman (σ) es igual a 5.67×10^{-8} W/ m^2 K^4 y el área (A) dependió de la superficie analizada.

$$\dot{Q}p,rad = e\,A\,\sigma\,(T_w^{\,4} - T_{amb}^{\,4}) \qquad (12)$$

El Flujo de Calor Perdido por los Gases de Combustión (Qg). Empleando la Ec. 13 se determinó "Qg"

$$\dot{Q}_g = \left[\frac{mc + m_{ai,r}}{teb} \right] Cp_g\,(T_g - T_{amb}) \qquad (13)$$

Para la evaluación de $\dot{Q}_g$, se consideró un consumo uniforme de masa de combustible (mc) y de aire ($m_{ai,r}$) durante el tiempo de ebullición y el calor específico de los gases de combustión (Cp_g) se estimó como el correspondiente al del aire a la temperatura de los gases de salida (T_g).

Empleando las fórmulas de Dulong (Centro de Conservación de Energía, 1989) que se presentan en las Ec. 14, 15 y 16 así como los resultados de los análisis que se presentan en la Tabla 1, se calculó los porcentajes en peso de los elementos presentes en el combustible: Carbono (%C), Hidrógeno (%H_2), Oxígeno (%O_2).

$$(\%C) = 0.59\,[\,0.01\,PC - 0.37\,(\%MV)\,] + 43.4 \qquad (14)$$

$$(\%H_2) = 0.069\,[\,0.01\,PC + (\%MV)\,] - 2.86 \qquad (15)$$

$$PC = 80.8\,(\%C) + 344\,[(\%H_2) - 0.125(\%O_2)] + 22.2(\%\,S) \qquad (16)$$

Empleando las relaciones estequeométricas de la combustión del carbón, los porcentajes en peso determinados por las Ec. 14, 15 y 16, y la masa de combustible consumida se estimó la masa de oxígeno y luego la masa de aire teórico (m_{ai}) requerida. Para estimar la masa de aire real ($m_{ai,r}$) para la combustión de la briqueta se consideró un factor de exceso de aire (φ) igual a 1.4, ver Ec. 17 (Claver y Salas, 1946).

$$m_{ai,r} = \varphi\, m_{ai} \qquad (17)$$

Influencia de la Radiación en el Proceso de Transferencia en el Modelo AE002D. Se realizó el balance del flujo de calor por radiación en el interior de la cámara de combustión considerandose involucradas tres superficies: la cara superior de la briqueta (1), la base de la olla (2) y las paredes de la cámara de combustión (3) En la cámara de combustión se asumió diferentes la absortividad de la emisividad. La Figura 5 esquematiza la Red de Radiación con la que se trabajó.

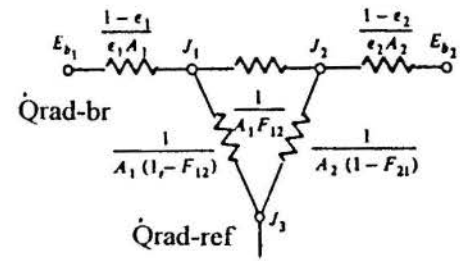


Figura 5 - Red de Radiación. Cocina modelo AE002D

Para la red considerada, el término "$\dot{Q}$rad-br" representa el flujo de calor emitido por la briqueta, "$\dot{Q}$gan,rad-ol" el flujo de calor que va a la olla y " $\dot{Q}$rad-ref" el flujo de calor que va a la cámara de combustión y que representa la influencia de la absortividad de la cámara de combustión (α_3) Los valores de $\dot{Q}$rad-br , $\dot{Q}$rad-ref y $\dot{Q}$gan,rad-ol se calcularon con las Ec. 18, 19 y 20 que se presentan a continuación

$$\dot{Q}rad\text{-}br = \frac{(Eb_1 - J_1)(\in_1 A_1)}{(1 - \in_1)} \qquad (18)$$

$$\dot{Q}gan,rad\text{-}ol = \frac{(J_2 - Eb_2)(\in_2 A_2)}{(1 - \in_2)} \qquad (19)$$

$$\dot{Q}rad\text{-}ref = \frac{(Eb_3)(A_3 \in_3) - (J_3)(A_3 \alpha_3)}{(1 - \alpha_3)} \qquad (20)$$

El término (Eb_i) representa el poder emisivo del cuerpo negro, (Ji) la radiosidad , ($\in_i$) emisividad, (A_i) área involucrada, (F_{ij}) factor de forma y los subíndices a la superficie correspondiente.

Flujo de Calor que Gana la Olla. El flujo de calor total que gana la olla ($\dot{Q}$gan-ol) se compone del flujo de calor que gana el agua y de las pérdidas por convección y radiación a través de las superficies de la olla (pared y tapa), como se indica en la Ec. 21.

$$\dot{Q}gan\text{-}ol = \dot{Q}ag + \dot{Q}p,ol \qquad (21)$$

Como el flujo de calor que gana la olla se debe al efecto combinado del calor de radiación y convección que recibe, posible determinar el flujo de calor por convección ($\dot{Q}$gan,con-ol) que recibe la olla mediante la Ec. 22.

$$\dot{Q}gan,con\text{-}ol = \dot{Q}ag + \dot{Q}p,ol - \dot{Q}gan,rad\text{-}ol \qquad (22)$$

RESULTADOS OBTENIDOS

En las Tablas 5 y 6 que muestran la distribución porcentual del flujo de energía se observa que la máxima eficiencia ($\dot{Q}$ag/$\dot{Q}$b) ocurre cuando la olla se halla muy cerca de la briqueta.

(H/Db=0.25) mientras que el mayor porcentaje de energía que se llevan los gases de combustión sucede cuando la olla se aleja de la briqueta (H /Db = 1.00).

El término "$\dot{Q}ag/\dot{Q}b$" de las Tablas 5 y 6 representa la eficiencia de la unidad analizada. Se observa entonces que los puntos de mayor eficiencia corresponden cuando H/Db= 0.25

Tabla 5 - Flujo Porcentual de Energía
Cocina modelo AE002D

H/Db	Db/Do	$\dot{Q}ag/\dot{Q}b$	$\dot{Q}g/\dot{Q}b$	$\dot{Q}p,cc/\dot{Q}b$	$\dot{Q}p,ol/\dot{Q}b$
0.25	0.58	46.3	32.4	15.5	5.8
0.25	0.68	44.6	36.1	15.0	4.3
0.25	0.83	42.6	39.7	14.6	3.1
0.50	0.58	42.3	33.8	17.9	6.0
0.50	0.68	37.6	39.4	18.3	4.7
0.50	0.83	39.8	35.1	20.9	4.2
1.00	0.58	38.3	33.8	21.8	6.1
1.00	0.68	35.0	34.1	26.1	4.8
1.00	0.83	35.6	39.6	21.1	3.7

Tabla 6 - Flujo Porcentual de energía
Cocina Modelo AE005H

H/Db	Db/Do	$\dot{Q}ag/\dot{Q}b$	$\dot{Q}g/\dot{Q}b$	$\dot{Q}p,cc/\dot{Q}b$	$\dot{Q}p,ol/\dot{Q}b$
0.25	0.31	43.2	25.3	17.2	14.1
0.25	0.36	27.9	51.5	13.0	7.6
0.25	0.44	36.3	40.9	14.1	8.7
0.50	0.31	35.5	42.5	9.7	12.3
0.50	0.36	35.5	42.3	11.5	10.7
0.50	0.44	31.2	48.5	10.4	9.9
1.0	0.31	33.9	42.7	11.7	11.7
1.0	0.36	31.2	51.2	10.3	7.3
1.0	0.44	26.0	57.6	9.0	7.4

En la Tabla 7 que muestra el consumo específico estandar en porcentaje, se observa que éste alcanza su mínimo valor para H/Db= 0.25 y el máximo cuando H/Db=1.0 en ambos modelos.

Tabla 7 - Consumo Específico Estandar en Porcentaje
Cocinas Modelo AE002D Y AE005H

	Modelo AE002D			Modelo AE005H		
	Db/Do			Db/Do		
H/Db	0.58	0.68	0.83	0.31	0.36	0.44
0.25	3.33	2.92	3.10	2.87	4.47	3.43
0.50	3.10	4.04	3.41	3.51	3.51	3.99
1.00	3.60	4.28	5.01	3.67	3.99	4.78

La Tabla 8, que presenta los resultados del análisis de radiación, permite apreciar que en promedio el porcentaje del calor de radiación emitido por la briqueta representa el 12.5% del total emitido por la briqueta.

Se observa ambién la influencia de la relaciones geométricas en los valores del factor de forma y en el calor por radiación que la briqueta gana.

Tabla 8 - Influencia de la Radiación
Cocina modelo AE002D

	$\dot{Q}rad\text{-}br/\dot{Q}b$ (%)			$\dot{Q}gan,rad\text{-}ol/\dot{Q}rad\text{-}br$(%)			F12		
H/Db	0.58	0.68	0.83	0.58	0.68	0.83	0.58	0.68	0.83
0.25	11.40	11.25	10.70	62.26	56.62	59.38	0.970	0.951	0.897
0.50	12.27	12.97	15.94	63.74	55.00	44.28	0.894	0.839	0.736
1.00	12.16	14.53	14.15	50.89	51.08	34.94	0.698	0.606	0.488

Las Figuras 6 y 7 muestran el tiempo de ebullición registrado en cada uno de los modelos ensayados. En el modelo AE002D se observa mayor rapidez para la combinación H/Db=0.25, mientras que en el otro modelo para la relación H/D=0.50.

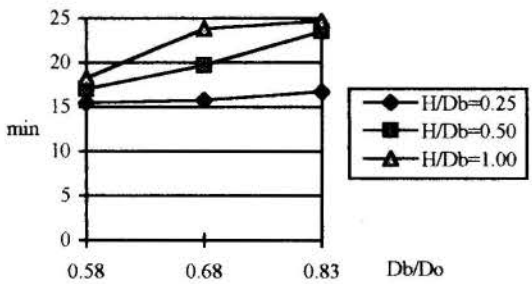


Figura 6 - Tiempo de ebullición. Cocina modelo AE002D

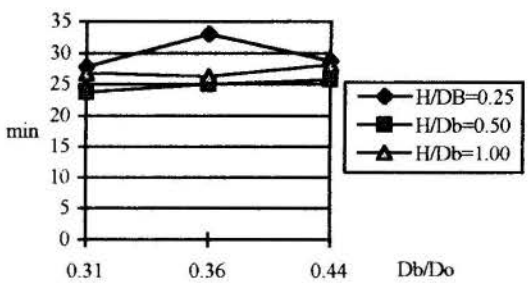


Figura 7 - Tiempo de ebullición. Cocina modelo AE005H

La Figura 8 muestra el flujo de calor por radiación que recibe la olla respecto al flujo de calor total emitido por la briqueta.

La Figura 9 que muestra la relación calor de convección respecto a calor de radiación que gana la olla, se puede apreciar la importancia de la convección en el proceso de transferncia de calor en cocinas a briquetas de carbón.

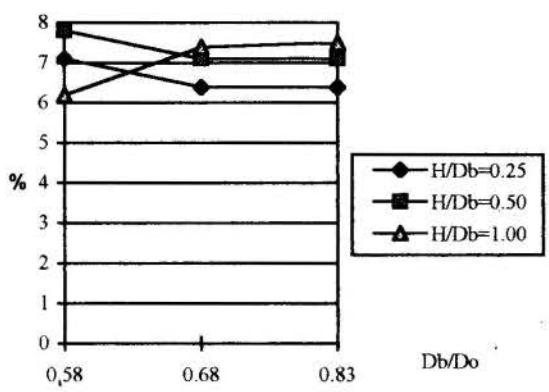


Figura 8 - $\dot{Q}gan,rad\text{-}ol$ / $\dot{Q}b$

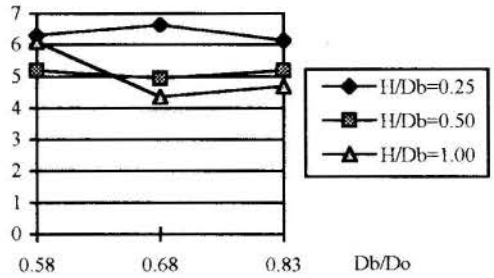


Figura 9 - $\dot{Q}$gan,con-ol / $\dot{Q}$gan,rad-ol

DESARROLLO DE ENCENDEDOR DE BRIQUETAS

Tradicionalmente, las briquetas eran encendidas empleando leña o trozos de carbón vegetal. El tiempo requerido era superior a 40 minutos, que en muchos casos ocasionaba rechazo al producto.

Luego de realizar ensayos se determinó que se requería para su encendido de 48 kJ/cm^2 y una temperatura en la base no menor a 500°C durante por lo menos 10 minutos. También se observó que era muy importante que el calor se distribuya de modo uniforme en la base de la briqueta y que no se obstruyan sus orificios con el encendedor.

Se desarrollo un producto con 26215 kJ/kg de poder calorífico, de forma esférica, con diámetros entre 20 a 25 mm, capaz de soportar una fuerza de compresión de 65 N en frío y en caliente. Se empleó como materia prima cisco de carbón vegetal y arcilla como material aglomerante en proporcionaes de 80% y 20% respectivamente. La técnica aplicada fue la de Agitación y rodadura en disco giratorio (Assureira ,1995). La porosidad del producto desarrollado permite su fácil encendido al ser rociado con kerosene y el tiempo de duración promedio de cada esfera es 15 minutos , alcanzando una temperatura de combustión superior a los 650°C. Actualmente se expende en el mercado con el nombre comercial de Chispa Morena.

CONCLUSIONES

El calor emitido por la briqueta se debe al efecto combinado de radiación y convección, predominando éste último que en promedio representa el 85%.

Se puede aprovechar hasta el 60% del calor de radiación emitido por la briqueta al reducir la distancia olla-briqueta debido al incremento del factor de forma.

Durante el proceso de combustión de la briqueta, el calor emitido por radiación se debe principalmente al efecto de incandescencia. Se ha observado que es posible intensificar el calor de radiación al incrementar el aporte de las llamas aumentando la relación H/Db o al provocar convección forzada.

El mecanismo de transferencia de calor predominante en cocinas a briquetas de carbón es la convección, que representa en promedio más de 80% del calor que recibe la olla, lo cual debe de ser considerado en el diseño y durante la operación.

El punto óptimo de funcionamiento (máximo rendimiento, mayor rapidez y menor consumo de combustible) ocurre para la relación H/Db=0.25 debido a la mayor la turbulencia en la cámara, lo cual crea un incremento del coeficiente de película, mejora el contacto de los gases con la superficie de la olla.

El porcentaje de energía que se llevan los gases de combustión supera el 35%,lo que muestra la necesidad de su aprovechamiento. Se recomienda trabajar con ollas protegidas. En el modelo de cocina diseñado denominado "La Rápida", se uso un aro protector alrededor de la olla incrementándose la eficiencia en un 8%.

La naturaleza del combustible condiciona el diseño de la cámara de combustión y origina un porcentaje importante de pérdidas a través de las paredes de la cocina. Se plantea considerar en el diseño el aprovechamiento de éste flujo de energía incorporando a la cocina un sistema de calentamiento de agua.

Las características del encendedor de briquetas desarrollado (forma, dimensiones, composición, porosidad y resistencia a la compresión) simplifica el proceso de encendido permitiendo su empleo con cualquier tamaño de briquetas e independiente del modelo de cocina

BIBLIOGRAFIA

Assureira E. Estela, 1995, "Pelletizing Coal", Proceeding, 3th International Congress Energy, Enviroment and Technological Innovation., Universidad Central de Venezuela, Vol.2, pp 119-124

Claver, M., 1945, "Termotecnia, transmisión, producción y aplicaciones", Ed. Dossat, pp 137-139

Centro de Conservación de Energía, 1989, "Conservación y Uso Racional d la Energía en la Industria"., Cap 3, pp 25-27

De Lepeleire,G., Krishna K., Verhaart P., Visser P., 1981, "Woodstove Compedium", Eidhoven Univer. of Tech., Eindhoven,

. Holman, J., "Transferencia de Calor", 1988, Mc Graw-Hill Inc., pp 370-373.

Ozisik K. M., 1985, "Heat Transfer a Basic Approach", Mc Graw-Hill, pp 437-438 y pp 643-651

Samame Boggio, Mario., 1992 " Plan Nacional de Energía ", Ministerio de Energía y Minas.

ABSTRACT

The purpose of this study was to test the process that determines the relationships among the briquette's diameter (Db), the pot's diameter (Do) and the height of the pot from the fuel bed (H) in order to improve the performance of the stoves.

Experiments were carried out on two metal portable stoves without chimeneys. The fuel was antrhacite coal briquette, a honey-comb type of cylinder with small holes parallel to the cylinder axis.

Energy balance and boiling tests were made in order to evaluate the stoves. The results are presented as non dimensional geometrical relations H/Db, Db/Do.

Convection was the predominant mechanism of the heat transfer. The best results was obtained for the relation H/Db = 0.25 for both models tested. On average 35% of the fuel's energy was lost by flue gases. This energy has to be used in order to improve the stove's performance.

In order to solve the briquette's lighted problem, a new product was developed used charcoal particles. The product was obtained by agglomeration processs called pelletizing using agitation method on a rotary pan. By this way, we transform charcoal powder in small balls of 25 mm which are used to light antrhacite coal briquette

ABCM

AVALIAÇÃO DE UM FORNO INTERMITENTE DE CERÂMICA VERMELHA USANDO BAGAÇO DE CANA COMO COMBUSTÍVEL

M. E. Corria; L. A. B. Cortez; E. E. Silva
Departamento de Construções Rurais - FEAGRI
Universidade Estadual de Campinas
13081-970 - Campinas

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se a avaliação de um forno intermitente de cerâmica vermelha, com substituição total de lenha por bagaço de cana-de-açúcar "in natura" (50 % de umidade). Foi desenvolvida uma metodologia especifica, baseada na Primeira Lei da Termodinâmica. Como resultado obteve-se uma eficiência média de 68 % , considerada elevada para um forno deste tipo e queimando biomassa. Foram avaliados também os tijolos produzidos, que ficaram dentro das normas estabelecidas pela ABNT.

INTRODUÇÃO

A indústria cerâmica brasileira tem na atualidade uma produção de produtos cerâmicos equivalente a aproximadamente 2,837 bilhões de dólares (ABC, 1994), dos quais 70% são de tijolos e telhas. Até 1974, no Brasil, nos fornos cerâmicos de tipos Túnel, Hoffman e intermitente de chama invertida utilizou-se o petróleo como combustível. A partir de então, com a crise energética começaram alguns estudos para substituir este combustível. Particularmente na indústria de cerâmica vermelha, foi substituído quase todo o combustível fóssil pela lenha. Atualmente, nas regiões próximas aos grandes centros urbanos, a lenha oferece certa dificuldade na aquisição devido à menor oferta. Segundo o Balanço Energético Nacional (B.E.N) do Ministério de Minas e Energia (1994) a produção de lenha de 1977 a 1992 baixou de 102 886 x 10^3 t para 88 534 x 10^3 t, o que leva a crer que no futuro poderá haver o risco de um aumento significativo do preço deste energético, além do impacto ecológico que ocasiona o desmatamento.

Por estas razões é que se tem estudado as várias possibilidades de substituição da lenha por outros combustíveis. As alternativas de substituição da lenha na indústria de cerâmica estrutural são várias, que podem surgir com as disponibilidades quantitativas, como o bagaço de cana-de-açúcar, cuja produção aumentou no Brasil de 1977 a 1992, segundo o B.E.N. de 26 850 x 10^3 t para 61 923 x 10^3 t.

Já foram feitos vários testes com este objetivo, como os do IPT na "Cerâmica Divisa Ltda", município de Indaiatuba, SP (IPT, 1985), onde se escolheu um forno com características predominantes da região, fazendo remodelações que condicionaram o mesmo para a queima eficiente do bagaço de cana, e na "Cerâmica São Luís Ltda" (IPT, 1987). Nestas e outras instalações foi substituído parcialmente o consumo de óleo ou lenha. No caso da Fazenda do Pinhal, no município de Boituva, S P., onde desenvolveu-se este trabalho, a substituição da lenha que vinha sendo utilizada como combustível foi total, ou seja, queima-se só bagaço durante todo o ciclo.

O bagaço utilizado nesta olaria provém de uma destilaria existente na mesma fazenda. Ele é queimado num forno intermitente de chama invertida, representativo desta indústria no país e principalmente no Estado, tal e como sai da destilaria (50 % de umidade b.u.), o que o diferencia dos outros testes feitos até agora, em que o bagaço era submetido a processos de secagem, moagem, etc. Outro aspecto a destacar da instalação de Boituva, é a remodelação feita empiricamente pelo proprietário, que reaproveita os gases de exaustão para a secagem dos tijolos.

OBJETIVOS

Pretende-se neste trabalho realizar uma análise técnico-econômica, do ponto de vista energético, da utilização do bagaço de cana como combustível na indústria de cerâmica vermelha, para o caso específico desta olaria.

Objetivos Específicos:

1. Determinar a eficiência energética de um forno intermitente para a produção de tijolos usando bagaço de cana como combustível;
2. Avaliar os parâmetros de qualidade do produto final (resistência a compressão e absorção de água) obtidos utilizando o bagaço de cana;

METODOLOGIA

Descrição física e de operação da instalação. Utiliza-se um forno intermitente do tipo de chama invertida ("downdraft"). Este consiste em: 6 câmaras retangulares com teto em forma de bóbada, construídas em alvenaria de tijolos comuns, como as fornalhas, situadas nas paredes posteriores do forno. As 6 câmaras são acopladas a uma mesma chaminé.

Os fornos são interligados entre si e com a chaminé através de canais subterrâneos dotados de registros do tipo guilhotina acionados manualmente. Através destes canais os gases de exaustão de um forno na fase de queima serão conduzidos a um forno na fase de pré-aquecimento. A exaustão dos gases úmidos do forno em pré-aquecimento é induzida por um ventilador centrífugo que descarrega os gases na chaminé. Durante o período de resfriamento do forno já queimado, o ar quente é conduzido também por estes canais para o secador de tijolos crus.

A operação dos 6 fornos e câmaras é realizada de tal modo que, enquanto um está queimando, o outro está na fase de pré-aquecimento, enquanto os demais estão nas fases de resfriamento, carga ou descarga, respectivamente, como mostra a figura 1.

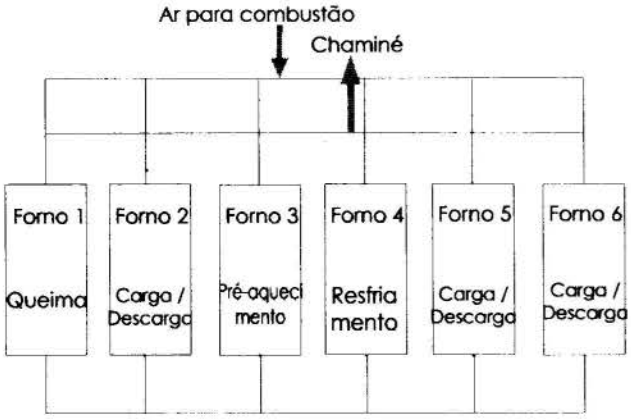


Figura 1: Esquema de operação dos seis fornos.

Levantamentos realizados na instalação durante um ciclo completo: pré-aquecimento e queima:

- Determinação da composição e arranjo da carga no forno;
- Medição do peso médio e umidade do tijolo no início do processo;
- Determinação do consumo de combustível mediante medições parciais ao longo do período;
- Medição das temperaturas dos gases na saída da fornalha, no interior do forno e da carga em diferentes pontos;
- Medição das temperaturas superficiais externas das paredes e do teto;
- Determinação dos teores de CO_2, CO, O_2 (análise de gases) nas saídas dos fornos;
- Determinação do fluxo de ar para a combustão;
- Determinação dos fluxos de gases na exaustão entre os fornos e a chaminé;

Retirar 10 amostras de tijolos de cada ponto da carga onde foram medidas as temperaturas, submetendo-as posteriormente a ensaios de absorção de água e resistência à compressão.

Na Figura 2 aparecem representados os pontos onde foram medidas temperaturas, fluxos e teor de CO_2, CO, O_2..

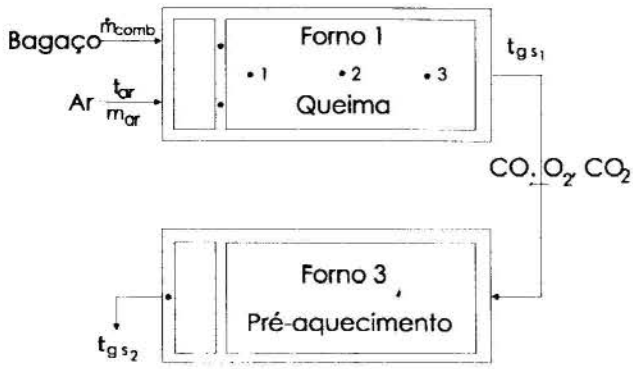


Figura 2: Pontos onde foram medidas temperaturas, fluxos de ar e combustível e realizados análises de gases. (•) Localização de termopares.

Avaliação energética do forno. O balanço de massa e energia consiste na aplicação da Primeira Lei da Termodinâmica ao processo considerado e estabelecerá a relação entre os fluxos de energia que cruzam o volume de controle e a variação da energia no interior do volume de controle escolhido.

O balanço geral é calculado pela seguinte expressão:

$$Q_{comb} = Q_{carg} + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_{evap} + \Delta Q \qquad [1]$$

onde:

Q_{comb} = Quantidade de calor introduzido ao forno com o combustível;

$$Q_{comb} = \sum (m_{comb_i} * PCI) \quad [kJ] \qquad [2]$$

Q_{carg} = Quantidade de calor aproveitada pela carga;

$$Q_{carg} = \sum_{i=1}^{3} Q_{carg_i} = \sum_{i=1}^{3} \left[m_{carg_i} * C_p * (t_f - t_i)_i \right] [kJ] \qquad [3]$$

C_p = calor específico do tijolo = 1,088 kJ / kg °C,

$$m_{carg_i} = m_{tijolo} * {}^1/_3 \text{ Nº de tijolos} \qquad [kg]$$

A divisão do número total de tijolos no forno em três partes iguais, obedece a que a distribuição de temperaturas não é homogênea, ou seja, que a temperatura da carga varia ao longo do forno, e se tem dados desta variação (t_f - t_i) em três regiões, onde foram colocados os termopares, então assume-se que a variação de temperatura registrada em cada um desses pontos corresponde a $^1/_3$ da carga total.

Q_{evap} = Quantidade de calor aproveitado pela carga para evaporação da água nela contida;

$$Q_{evap} = W_{carg} * r \qquad [kJ] \qquad [4]$$

W_{carg} = conteúdo de umidade da carga = $W_{tijolo} * m_{carg}$ [kg]

r = calor latente da água = 2 453 kJ/kg

Q_2 = Calor sensível dos gases de exaustão;

$$Q_2 = \sum Q_{2_i} = \sum \left[q_{2_i} * PCI * m_{comb_i} \right] \quad [kJ] \qquad [5]$$

Q_3 = Quantidade de calor perdido por combustão química incompleta;

$$Q_3 = \sum Q_{3_i} = \sum \left[q_{3_i} * PCI * m_{comb_i} \right] \quad [kJ] \qquad [6]$$

Q_4 = Quantidade de calor perdido por combustão mecânica incompleta;

$$Q_4 = 0{,}02 * Q_{comb} \quad [kJ] \qquad [7]$$

Instalações e Equipamentos. Durante os testes foi utilizado um datalogger para a leitura contínua das temperaturas, medidas por termopares tipo K de isolação mineral (cromel - alumel) Dext = 3 mm. As medições dos fluxos de ar e gases se realizaram com um tubo de Pitot e um manômetro de tubo em "U".

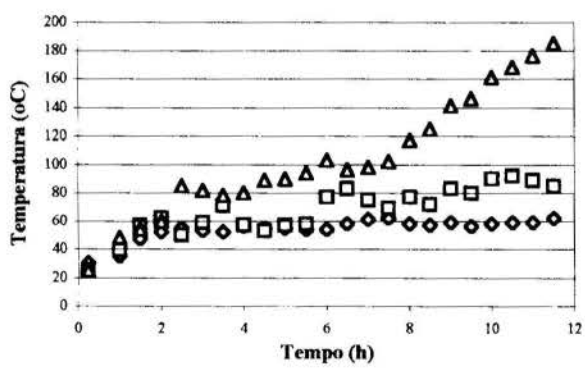
Para a análise de gases de exaustão utilizou-se um analisador contínuo de gases da Kron, "Testo 33". Em alguns testes foi utilizado um analisador de gases ORSAT para verificar duplamente a análise de gases.

RESULTADOS

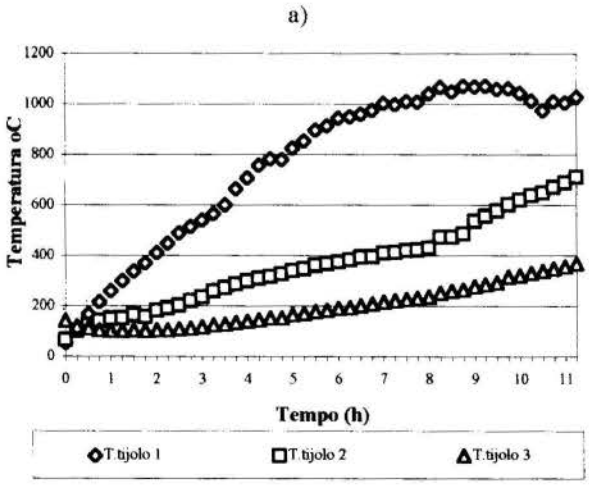
Tijolos. A temperatura dos tijolos foi monitorada durante o ciclo todo, desde o começo do pré-aquecimento do forno até o fim da queima. Os termopares (3) foram distribuídos em diferentes zonas do forno como se mostrou na figura 2.

Considerando a disponibilidade de instrumentação, não foram monitoradas as temperaturas dos tijolos dentro do forno 3, ou seja, aquele que foi pré-aquecido, no lugar foram assumidas as temperaturas do forno 1 durante o processo de pré-aquecimento.

Na figura 3 aparece o comportamento médio da temperatura dos tijolos durante todo o ciclo nos 3 testes realizados



a)



b)

Figura 3: Comportamento da temperatura da carga: a) durante o pré-aquecimento; b) no processo de queima.

A temperatura da carga no ponto 3 vê-se afetada pela acumulação de partículas de bagaço nos condutos para a circulação dos gases, entupindo estes e impedindo que os gases quentes cheguem rapidamente até esta zona. Recomenda-se aumentar o espaço entre os tijolos fazendo maiores os condutos para a passagem dos gases, embora em detrimento da quantidade de tijolos a colocar dentro do forno.

Gases. A figura 4 apresenta os resultados das medições, nela pode-se observar que a temperatura na entrada do forno sobe rapidamente até 800°C, e a partir de então vai subindo devagar até 1100 °C.

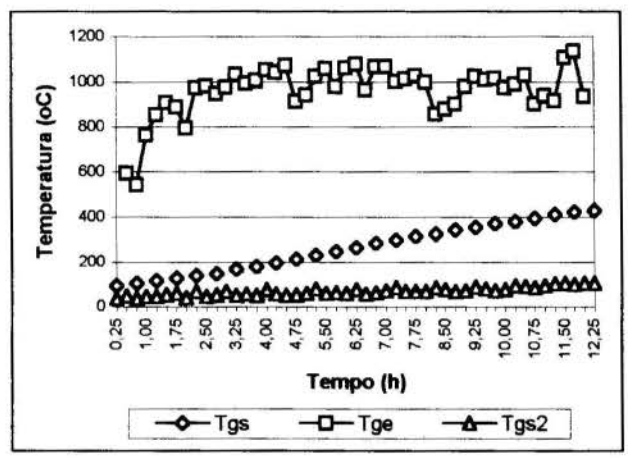


Figura 4: Temperatura dos gases de combustão durante a queima no forno 1 e pré-aquecimento do forno 3. Tgs - temperatura dos gases na saída do forno 1; Tgs2 - temperatura dos gases na saída do forno 3; Tge - temperatura dos gases na entrada do forno 1 (saída da fornalha).

A temperatura dos gases na saída do forno 1 sobe praticamente de maneira linear até aproximadamente 400 °C. A diferença nas curvas das temperaturas de saída dos gases no forno 1 e no forno 3, representam o calor recuperado com o pré-aquecimento deste último.

As temperaturas, tanto dos gases como dos tijolos foram medidas de 15 em 15 minutos, porém a composição dos gases de exaustão, na saída para a chaminé, foi obtida através de amostras tomadas cada 30 minutos. Os resultados destas análises são apresentados na figura 5.

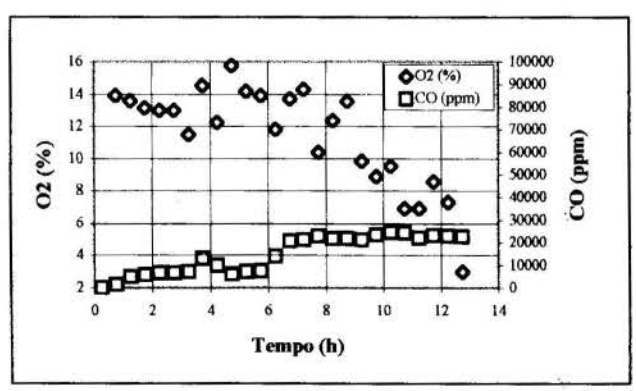


Figura 5: Concentrações de O_2 e CO nos gases da combustão à saída do forno, em %.

A porcentagem de oxigênio cai constantemente desde 16-14 % no início dos testes até menos de 6 % no fim. Os valores

de CO sobem durante a queima, mantendo-se dentro de um intervalo admissível para este tipo de forno (0 - 2 400 ppm).

O coeficiente de excesso de ar (α), apresentou valores considerados bons, e foi diminuindo na medida que o processo avança e a temperatura vai aumentando, chegando a ter no final valores quase estequiométricos. Os resultados são representados na figura 6.

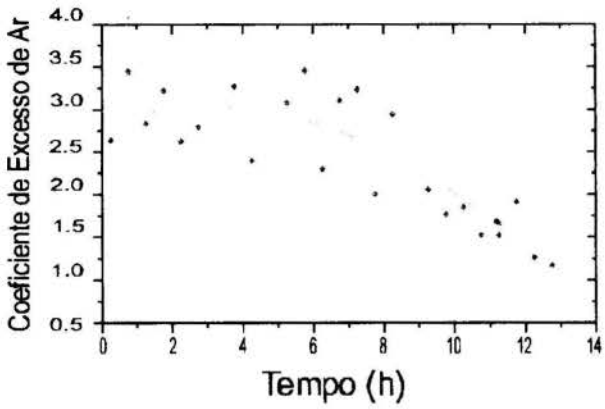


Figura 6: Coeficiente de excesso de ar durante o processo de queima.

Observa-se aqui, pelos resultados das figuras 5 e 6, um bom controle do ar, devido a que o bagaço na rosca de alimentação constitui uma vedação da fornalha evitando o ar em excesso.

O consumo de bagaço durante a queima foi dividido em intervalos de meia hora, onde foram somados o número de cestos fornecidos em cada intervalo. Ao final foi pesado um cesto (9,5 kg líquido) e calculada a quantidade de bagaço, em peso, em cada intervalo e no total (3 763,2 kg). O resultado destas somas mostra-se na figura 7 e é equivalente a 206 kg de bagaço / kg de tijolo.

Cálculo das perdas.

- Perdas com os gases de exaustão.

Para determinar as perdas de calor com os gases de exaustão (q_2), considera-se o percurso todo dos gases, ou seja, a temperatura dos gases usada para os cálculos é a da saída do forno número 3. Os resultados aparecem na figura 8. Estas perdas geralmente são as maiores ocorridas num processo de combustão, porém, com a recuperação do calor dos gases para o pré-aquecimento do outro forno, a quantidade de calor perdida em relação ao calor total disponível (Q_2) só representa 4 %.

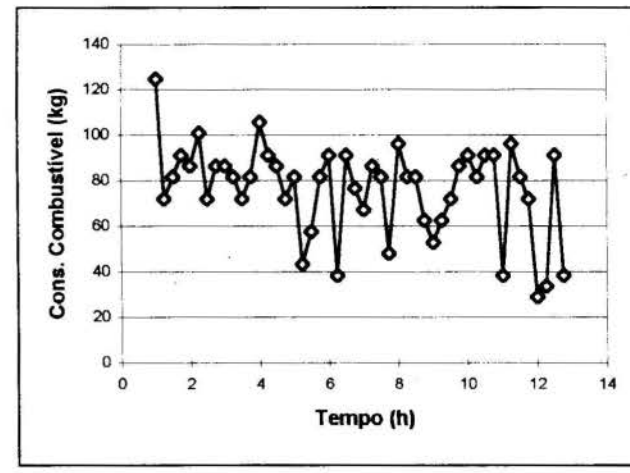


Figura 7: Consumo de combustível (bagaço), em kg.

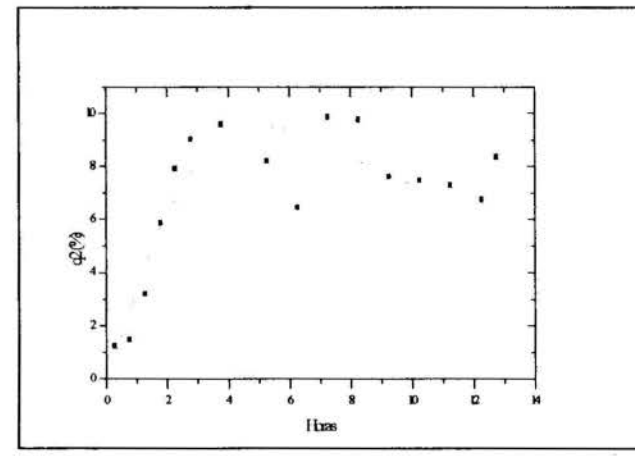


Figura 8: Perdas com o gás de exaustão (q_2) na saída do forno em pré-aquecimento, em %.

- Perdas por combustão química incompleta.

As perdas por incombustão química (Q_3), são equivalentes a 5 % do calor disponível no forno. A figura 9 representa a evolução de q_3 durante o período de queima do forno.

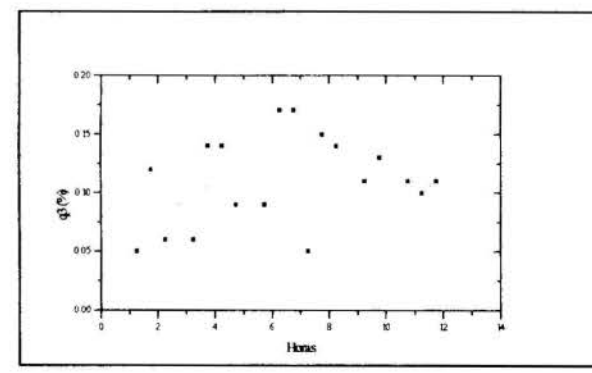


Figura 9: Perdas por combustão química incompleta (q_3), em %.

Balanço de energia. O balanço de energia do forno, determinado pela Primeira Lei da Termodinâmica é representado na figura 10, expresso em porcentagem.

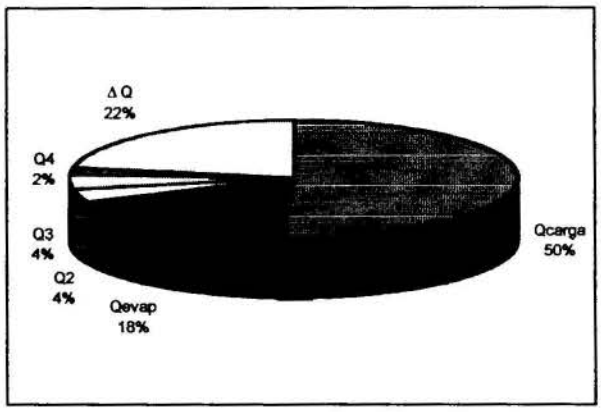


Figura 10:Balanço térmico do forno durante todo o processo.

Considerando como calor útil a soma daquelas quantidades de calor que foram aproveitadas pela carga de ambos fornos (pré-aquecimento e queima) para evaporar a umidade inicial ($Q_{evap.}$) e para se queimar (Q_{carg}), tem-se então um **68 %** de aproveitamento do calor total introduzido no forno com o combustível, ou seja, tem-se **68 %** de eficiência.

Propriedades mecânicas dos tijolos. Após cada teste térmico foram retirados 10 tijolos, que foram analisados sua resistência à compressão e absorção de água. A tabela 1 mostra os resultados destes ensaios.

Tabela 1 -Resultados dos ensaios fisico-mecânicos dos tijolos coletados nos três pontos onde se registraram as temperaturas.

	Ponto1*	Ponto 2*	Ponto 3*
Dimensões (mm)	208 x 101 x 44	213 x 104 x 46	214 x 104 x 46
Peso (kg)	1.57	1.65	1.6 4
Absorção de Água (%)	14.47	14.53	16.59
Resistência à Compressão	-	6.01	5.67

(*) Posição dos termopares na carga, fig. 2.

Na tabela 1 pode-se ver que os tijolos obtidos, apresentam níveis de resistência à compressão e absorção de água admisíveis para seu uso, embora a resistência à compressão seja muito superior às recomendadas nas normas. Isto leva a considerar que o tempo de queima está sendo muito superior ao necessário. Uma diminuição do tempo de queima resultaria numa economía de combustível.

Balanço Econômico. O balanço econômico não limitou-se ao bagaço de cana-de-açúcar. Com o objetivo de comparação mostrou-se também para outras biomassas, que em ocasiões também são usadas nesta olaria.

A tabela 2 recolhe os dados e resultados do balanço. Todos os cálculos são expressos em US$ por milheiro de tijolos.

Tabela 2 - Balanço econômico do forno para diferentes biomassas.

US$... 1000 tijolos	Bagaço de Cana	Cavaco		Lenha
		Pinus	Eucaliptus	
Combustível	7.00	15.82	18.7	16.00
Enrg. Elétrica	6.00	6.00	6.00	6.00
Mão-de-obra	23.00	23.00	23.00	23.00
Barro	15.00	15.00	15.00	15.00
Manutenção e Administração	6.00	6.00	6.00	6.00
Preço do tijolo	66.00	66.00	66.00	66.00
Lucro	9.00	0.18		

Segundo os dados da tabela 2, a combustão do bagaço de cana-de-açúcar resulta a mais econômica dentre as opções da olaria, pois o lucro é bem superior aos obtidos com os outros combustíveis. Cabe salientar que os cálculos foram feitos considerando os preços destes combustíveis na região, incluso o do bagaço de cana.

CONCLUSÕES

1. O forno avaliado apresenta uma elevada eficiência energética (68 %) em comparação com fornos deste tipo e usando biomassa como combustível, devido à recuperação do calor dos gases de exaustão para o pré-aquecimento da carga e do forno.
2. O aproveitamento dos gases para pré-aquecer outro forno resulta em valores muito baixos das perdas com os gases de exaustão (Q_2 = 4 %).
3. O controle do excesso de ar é mantido durante o ciclo todo, refletindo-se isto nos teores de oxigênio nos gases de exaustão e no coeficiente de excesso de ar, que mantêm-se em níveis aceitáveis.
4. Economicamente o bagaço de cana-de-açúcar mostra ser o combustível commaior vantagem, comparado com outras biomassas utilizadas (lenha e cavaco de pinus ou eucaliptus).
5. Outra vantagem deste forno é que permite a combustão do bagaço de cana-de-açúcar durante todo o ciclo, em diferença das experiências anteriores onde era também usada a lenha ou o petróleo na fase de aquecimento.
6. O bagaço usado no forno vem diretamente da moagem (50 % de umidade b.u) e não precisa passar por processos de secagem e moagem, o que faz dele um energético mais econômico do que o usado nas experiências anteriores, onde era submetido a estes tratamentos, encarecendo-o.

BIBLIOGRAFIA

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE CERÂMICA, "Anuário Brasileiro de Cerâmica 1994", SP.

INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS DO ESTADO DE SÃO PAULO, IPT, 1985, "Utilização do bagaço de cana como combustível na indústria de cerâmica vermelha". Relatório Nº 23.124.

INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS DO ESTADO DE SÃO PAULO, IPT, 1987, "Utilização do bagaço de cana como combustível na indústria de cerâmica vermelha". Relatório Nº 25.607, setembro.

MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGÍA, 1994, "Balanço Energético Nacional", Brasília.

NETO, LYRA, 1983, "Uma experiência com bagaço de cana a granel como combustível para a queima de tijolos em forno

contínuo tipo "Hoffmann" em uma cerâmica de Alagoas", Cerâmica, N°. 29, pp. 25 A., São Paulo.

ABSTRACT

In this work the evaluation of ceramic inverted flame intermittent kiln with total substitution of firewood by 'in nature' sugar cane bagasse (50 % of moisture h.b.) is presented. It was developed a test methodology based on the First Law of Thermodinamics, specifically for intermittent ovens. As result an average efficiency of 68 % was obtained, considered a high value this type of kilns burning biomass.

A GENERALIZED ALGORITHM FOR SIMULATION OF THERMAL SYSTEMS

Melo, C. A. and Abreu, G. L. C. M.
Department of Mechanical Engineering
Federal University of Uberlândia
38400-089 - Uberlândia - MG - Brazil

SUMMARY

An algorithm with modular characteristcs was developed. The modules are composed of specific routines related to system components. In the data file the working fluids, the characteristics of each component and the known variables are indicated. Based on the index of mass rate vectors, the indexes of mass rate are generated upstream and downstream of each node. The conservation laws are used to compose, automaticaly, the system of equations, which are solved by Newton Raphson method for more than one equation.

INTRODUCTION

System simulation presumes knowledge of the performance characteristics of all components as well as equations for thermodynamic properties of working substances.

The simulation of thermal systems, that can be applied to heating and cooling plants, consists of calculation of all operating variables such as temperatures, pressures, especific energy and fluid flow rates at a given time.

Several users need to simulate thermal system, such as chemical and process industries, air conditioning engineers and Thermal Power Plants.

Evans et. al. (1968) has shown that chemical and process industries have used generalized programs for several years.

Several proprietary programs have been developed in the industry. Examples of these programs are PACER (Purdue-Dartmouth),, MAEBE (University of Tennessee), COPE (Esso Research and Engineering), CHEOPS (Shell Oil), PEDLAN (MobilOil) and FLEXIBLE FLOWSHEET (M. W. Kellogg).

Stoecker (1971) developed a generalized program for steady state system simulation, however, the program of this author does not generate the equation system by means of specifics routines.

Reynolds (1979) developed equations to compute physical and thermodynamic properties of working substances.

Klein and Alvarado (1993) developed the program EES (Engineering Equation Solver) for the solution of a set of algebraic equations and thermophysical property functions useful for engineering calculations. Nevertheless, this program do not generate the equations system.

The motivation of this work rose out from the experience of teaching mechanical engineering, thermodynamics and thermal systems. To learn the material in these courses, the student should solve problems. However, much of time and effort required to solve problems result from looking up property information and generation and solving the apropriate equations.

Characteristc curves related to system devices, subroutines to compute physical and thermodynamic properties and subroutines that apply the conservation laws are used to compose, automaticaly, the system of equations, which are solved by Newton-Raphson method.

FORMULATION

The system of equations is generated based on the following data file:

```
nn  np  nc

npk  inpk1 pk1  inpk2 pk2 . . . inpkn pkn
ntk  intk1 tk1  intk2 tk2 . . . intkn tkn
nqk  inqk1 qk1  inqk2 qk2 . . . inqkn qkn

z_n1  z_n2 . . . z_nn

unp1  dnp1  Dp1  Lp1  Sk_1  rp1
unp2  dnp2  Dp2  Lp2  Sk_2  rp2
                .
                .
                .
unpn  dnpn  Dpn  Lpn  Sk_n  rpn

efc1  Ẇc1  Q̇1  isob1  isot1  isos1  isoh1

efc2  Ẇc2  Q̇2  isob2  isot2  isos2  isoh2
                .
                .
                .
efcn  Ẇcn  Q̇n  isobn  isotn  isosn  isohn

unc1  dnc1  nuc2  ndc2 . . . uncn  dncn
```

Figure 1 - Data File

Where:

nn - number of nodes
np - number of pipes
nc - number of components
npk - number of known pressures
inpkn - node index indicating the location where the pressure n is known
pkn - known pressure n
ntk - number of known temperatures
intkn - node index indicating the location where the temperature n is known
tkn - known temperature n

nqk - number of known mass quality
qkn - known mass quality n
inqkn - node index indicating the location where the mass quality is known
z_{nn} - node n level
unpn - upstream node of the piping n
dnpn - downstream node of the piping n
Lpn - length of the pipe n
Sk_n - sum of all factors of located loss
rpn - roughness of pipe n
efcn - efficiency of the component n
$\dot{W}$cn - power of the component n
$\dot{Q}$n - rate of heat transfer of the component n
isobn - if the transformation in the component n is isobaric
isotn - if the transformation in the component n is isothermic
isosn - if the transformation in the component n is isoentropic
isohn - if the transformation in the component n is isoenthalpic
If (efcn > 1) then npcn = efcn
read x_1 y_1, x_2 y_2, ... , x_n y_n
npcn - number of points of the characteristic curve of the component n.
x_n - coordinate in the x direction of the characteristic curve
y_n - coordinate in the y direction of the characteristic curve
uncn - upstream node of the component n
dncn - downstream node of the component n

Based on the index of mass rate vectors, the indexes of mass rate are, automaticaly, generated upstream and downstream of each node.

The system of equations is as follow:

Conservation of mass:

$$\sum \dot{m}_{un1} - \sum \dot{m}_{dn1} = 0 \qquad (1)$$

$$\sum \dot{m}_{un2} - \sum \dot{m}_{dn2} = 0 \qquad (2)$$

$$\vdots$$

$$\sum \dot{m}_{unn} - \sum \dot{m}_{dnn} = 0 \qquad (nn)$$

The subscripts unn and dnn indicate, respectively, the upstream and downstream positions of the node n. $\dot{m}$ represents the mass rate.

Energy equation:

$$\dot{Q}_{c1} - \dot{W}_{c1} - [\sum \dot{m}_{dc1}(h_{dc1} + \frac{V_{dc1}^2}{2} + z_{dc1} \cdot g) - \sum \dot{m}_{uc1}(h_{uc1} + \frac{V_{uc1}^2}{2} + z_{uc1} \cdot g)] = 0 \qquad (nn+1)$$

$$\dot{Q}_{c2} - \dot{W}_{c2} - [\sum \dot{m}_{dc2}(h_{dc2} + \frac{V_{dc2}^2}{2} + z_{dc2} \cdot g) - \sum \dot{m}_{uc2}(h_{uc2} + \frac{V_{uc2}^2}{2} + z_{uc2} \cdot g)] = 0 \qquad (nn+2)$$

$$\vdots$$

$$\dot{Q}_{cn} - \dot{W}_{cn} - [\sum \dot{m}_{dcn}(h_{dcn} + \frac{V_{dcn}^2}{2} + z_{dcn} \cdot g) - \sum \dot{m}_{ucn}(h_{ucn} + \frac{V_{ucl}^2}{2} + z_{ucn} \cdot g)] = 0 \qquad (nn+nc)$$

$$p_{up1} - p_{dp1} - K_1 \cdot \dot{m}_1^2 = 0 \qquad (nn+nc+1)$$

$$p_{up2} - p_{dp2} - K_2 \cdot \dot{m}_2^2 = 0 \qquad (nn+nc+2)$$

$$\vdots$$

$$p_{upn} - p_{dpn} - K_{np} \cdot \dot{m}_{np}^2 = 0 \qquad (nn+nc+np)$$

The subscripts are defined as follow:
cn - component n
dcn - downstream of the component n
ucn - upstream of the component n
upn - upstream of the pipe n
dpn - downstream of the pipe n

$\dot{Q}$ is the rate of heat transfer and $\dot{W}$ is the power. The rate of heat transfer $\dot{Q}$ and the power $\dot{W}$ are adjusted, respectively, based on the characteristic curve of each component, as follow:

$$\dot{Q}_{cn} = A_{cn} \cdot \dot{m}_{cn}^2 + B_{cn} \cdot \dot{m}_{cn} + C \qquad (a)$$

$$\dot{W}_{cn} = E_{cn} \cdot \dot{m}_{cn}^2 + F_{cn} \cdot \dot{m}_{cn} + G \qquad (b)$$

Considering nn + nc + np = n, the equations (1) to (n) can be written in implicit form as follow:

$$F_1(V_1, V_2, \ldots, V_n) = 0 \qquad (1.1)$$

$$F_2(V_1, V_2, \ldots, V_n) = 0 \qquad (1.2)$$

$$\vdots$$

$$F_n(V_1, V_2, \ldots, V_n) = 0 \qquad (1.n)$$

Considering the initial guessed values for the variables as: $V_1^0, V_2^0, \ldots, V_n^0$, one can write:

$$(V_1^0 - V_1)\frac{\partial F_1}{\partial V_1} + (V_2^0 - V_2)\frac{\partial F_1}{\partial V_2} + \ldots + (V_n^0 - V_n)\frac{\partial F_1}{\partial V_n} = 0 \qquad (2.1)$$

$$\left(V_1^0 - V_1\right)\frac{\partial F_2}{\partial V_1} + \left(V_2^0 - V_2\right)\frac{\partial F_2}{\partial V_2} + \ldots + \left(V_n^0 - V_n\right)\frac{\partial F_2}{\partial V_n} = 0 \qquad (2.2)$$

$$\vdots$$

$$\left(V_1^0 - V_1\right)\frac{\partial F_n}{\partial V_1} + \left(V_2^0 - V_2\right)\frac{\partial F_n}{\partial V_2} + \ldots + \left(V_n^0 - V_n\right)\frac{\partial F_n}{\partial V_n} = 0 \qquad (2.n)$$

$PD_{I,J}$ represents the partial derivative of the function I regarding to variable J. These partial derivatives are calculated as described in Figure 2:

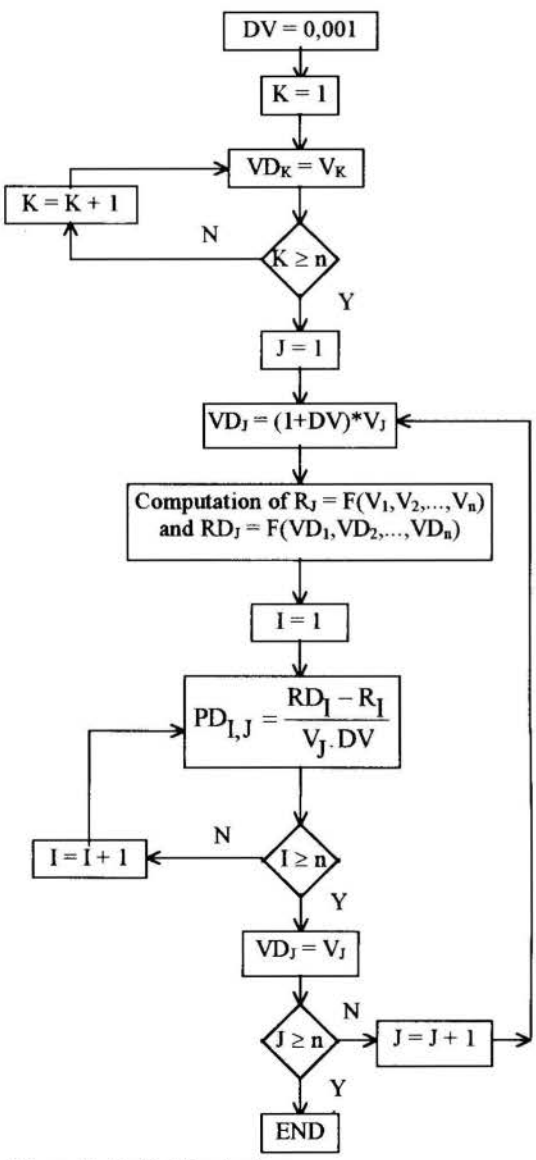


Figure 2 - Partial Derivatives

The unknows of the linear system (2.1) to (2.n) are:

$$V_1^{corr} = V_1^0 - V_1 \qquad (3.1)$$

$$V_2^{corr} = V_2^0 - V_2 \qquad (3.2)$$

$$\vdots$$

$$V_n^{corr} = V_n^0 - V_n \qquad (3.n)$$

The new guessed values for the variables are:

$$V_1^0 = V_1^{corr} - V_1 \qquad (4.1)$$

$$V_2^0 = V_2^{corr} - V_2 \qquad (4.2)$$

$$\vdots$$

$$V_n^0 = V_n^{corr} - V_n \qquad (4.n)$$

The solution procedure comprising eqs. 2 to 4 is used to solve the non-linear set of eqs. (1.1) to (1.n). It is called Newton-Raphson for more than one equation.

The generalized algorithm is as follow:

1. The input data is read;

2. The indexes of mass rate are generated upstream and downstream of each node;

3. The thermodynamic properties; where the states are defined, are calculated;

4. All the variables of the system are guessed;

5. The thermodynamic properties, after the states are known, are calculated;

6. The state in the outlet of each component is defined based on the thermodynamic transformation (isothermic, isoenthalpic, isentropic and isobaric);

7. The residue equations F_1 to F_n are calculated;

8. The partial derivatives are calculated;

9. The non-linear system (1.1) to (1.n) is solved;

10. The new guessed values for the variables are determined until convergence is reached.

The thermodynamic properties of the working fluids for the saturated and superheated states are determined as follow:

$$u = \int_{T_0}^{T} C_v^0(T)dT + \int_0^{\rho} \frac{1}{\rho^2}\left[p - T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{\rho}\right]d\rho + u_0 \qquad (5)$$

where:

u - internal energy;
u_0 - reference value;
C_v^0 - Ideal gas especific heat;
ρ - vapour density;
p - pressure;
T - Temperature.

$$p = \rho RT + F(T,\rho) \qquad (6)$$

R - Constant of the compressive substance
F(T, ρ) - Function of the variables ρ and T and of the working fluid.

The following equations determine the enthalpy and entropy:

$$h = u + pv \qquad (7)$$

$$s = \int_{T_0}^{T} \frac{C_v^0(T)}{T}dt - R\ln\rho + \int_0^{\rho} \frac{1}{\rho^2}\left[\rho R - \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_{\rho}\right]dp + s_0 \qquad (8)$$

The latent heat (h_{lv}) is determined from Clapeyron equation, as:

$$h_{lv} = Tv_{lv}\frac{dp_{sat}}{dT_{sat}} \qquad (9)$$

The entropy and internal energy of vaporization are calculated as:

$$s_{lv} = \frac{h_{lv}}{T} \qquad (10)$$

$$u_{lv} = h_{lv} - p_{sat}v_{lv} \qquad (11)$$

The equation in the generalized form is determined as:

$$p = p(T,\rho) \qquad (12)$$

The ideal gas specific heat is determined as a function of temperature:

$$C_v^0 = C_v^0(T) \qquad (13)$$

The saturation pressure is:

$$p_{sat} = p_{sat}(T_{sat}) \qquad (14)$$

The saturated liquid density is determined as:

$$\rho_l = \rho_l(T_{sat}) \qquad (15)$$

The thermodynamic properties in the liquid region are determined as follow:

$$f = f_p + (f_{es} - f_{ps})\left(\frac{\ln pc - \ln p}{\ln pc - \ln p_s}\right) \qquad (16)$$

Where:

f - Generalized property that can be u, h, s or ρ;
f_p - Function of p and T calculated, respectively, by equation (5), (7), (8) and (13);
f_{es} - This is the saturation value of f at temperature T, determined by:

a - Calculate $\frac{dp_{sat}}{dT_{sat}}$ from equation (9);

b - The saturated vapour properties u_v, h_v, s_v and ρ_v, using the equations (5), (7), (8) and (12);

c - The saturated liquid density is determined by the equation (15);

d - h_{lv} and s_{lv} are calculated using equations (9) and (10);

e - The saturated liquid properties u_l, h_l, s_l and ρ_l are calculated by the subtractions $u_v - u_{lv}$, $h_v - h_{lv}$, $s_v - s_{lv}$ and $\rho_v - \rho_{lv}$.

f_{ps} - This is the value of the saturation temperature, obtained by equation (14);

Equations (12), (13), (14) and (15) are adjusted by the least square method and data available from Reynolds (1979).
These equations are differentiated and integrate to obtain the thermodynamic properties.
If two properties pr_1 and pr_2, which are functions of others properties pr_3 and pr_4 are known, as:

$$pr_1 = f_1(pr_3, pr_4) \qquad (17)$$

$$pr_2 = f_2(pr_3, pr_4) \qquad (18)$$

the properties pr_3 and pr_4 are iteratively determined by Newton Raphson method for more than one equation.
When a thermodynamic property is written in the implic it form, it can determined by Newton-Raphson method.

The separated flow model, described by Collier (1972), is used to calculate the pressure gradient for two-phase flow, as follow:

The mean velocity is:

$$V_s = \frac{\dot{m}}{\rho . A} \qquad (19)$$

The properties of the two fase are: $\rho_l, \rho_v, \upsilon_l, \upsilon_v$

The mass flow is defined as:

$$G_v = X\,G \qquad (20)$$

The liquid mass flow is:

$$G_l = G - G_v \qquad (21)$$

The mean velocities of vapour and liquid phases are:

$$V_{vs} = \frac{G_v}{\rho_v . A} \quad \text{and} \quad V_{ls} = \frac{G_l}{\rho_l . A} \qquad (22)$$

The Reynolds number of the two phases are:

$$Re_{vs} = \frac{V_{vs} . D}{\upsilon_v} \quad \text{and} \quad Re_{ls} = \frac{V_{ls} . D}{\upsilon_l} \qquad (23)$$

The friction factors for the of the vapour phase flow (f_{vs}) and liquid phase flow (f_{lv}) are, iteratively, calculated based on the Colebrook formula.

The pressure gradients on the vapour and liquid phases are:

$$\left(\frac{\Delta p}{\Delta L}\right)_{vs} = \frac{\rho . V_{vs}^2 . f_{vs}}{2 . D} \quad \text{and} \quad \left(\frac{\Delta p}{\Delta L}\right)_{ls} = \frac{\rho_l . V_{ls}^2 . f_{ls}}{2 . D} \qquad (24)$$

$$\phi = \left(\frac{\Delta p}{\Delta L}\right)_{ls} / \left(\frac{\Delta p}{\Delta L}\right)_{vs} \qquad (25)$$

$$\psi_v = \sqrt{1 + C . \phi + \phi^2} \qquad (26)$$

The total pressure gradient for the saturated state is:

$$\left(\frac{\Delta p}{\Delta L}\right) = \psi_v^2 . \left(\frac{\Delta p}{\Delta L}\right)_{vs} \qquad (27)$$

RESULTS AND DISCUSSION

The regenerative cycle, shown in figure 3, is used to analyse the output variables.

In this thermal cycle, the nodes upstream and downstream of each component are randomly chosen.

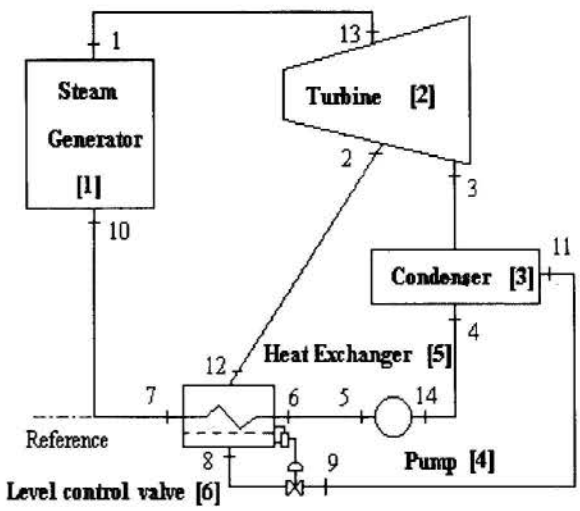


Figure 3 - Regenerative Cycle.

Figure 4 shows the input data file for cycle:

```
14 6 6

2 2 1E6 3 0.005E6
3 1 600 7 90 5 33
2 8 0 4 0

5 4 4 3 0 0 0 -1 -1 5 3 0 5 0

7 10 0.2 500 0 1E-5
5 6  0.2 500 0 1E-5
9 11 0.2 10  0 1E-5
2 12 0.2 15  0 1E-5
1 13 0.2 15  0 1E-5
4 14 0.2 15  0 1E-5

0.9 0 3E6 0 1 1 1
0.8 3E6 0 1 1 0 1
0 0 -3E5 0 1 1 1
9 5 233 10 232 20 231 30 230 40 225 50 220 60 210
    70 190 85 157
0 0 0 0 1 1 1
0 0 0 1 1 1 0

10 1 1  13 2 2  13 3 2  6 7 5  12 8 5  14 5 4

11 4 3  3 4 3  8 9 6
```

Figure 4 - Input data file for the cycle of figure 3.

The thermodynamic properties of each node are shown in table 1 and the heat transfer rate and the power at each component are shown in table 2.

Table 1 - Thermodynamic properties

Node	p MPa	T [°C]	s [KJ/Kg°K]	h [MJ/Kg]	ρ [Kg/m³]
1	1,4597	600,0	7,850537	3,693896	3,6472
2	1,0000	554,1	7,908870	3,596024	2,6345
3	0,0050	86,21	8,697066	2,661534	0,0301
4	0,0050	32,86	0,473967	0,137166	994,54
5	1,5289	33,00	0,476377	0,139222	995,33
6	1,5174	33,00	0,476379	0,139212	995,33
7	1,5174	90,00	1,191911	0,378140	965,96
8	0,9988	179,8	2,137333	0,762297	887,08
9	0,0081	41,74	2,460843	0,762297	0,2284
10	1,4597	90,00	1,191969	0,378103	965,93
11	0,0050	41,74	8,447971	2,577670	0,0344
12	0,9988	554,1	7,909395	3,596034	2,6315
13	1,3745	600,0	7,878890	3,694553	3,4327
14	0,0339	32,86	4,743293	0,137235	994,61

Table 2 - Rate of heat transfer and power

Component	$\dot{Q}$ - Watts	$\dot{W}$ - Watts
1	$7,67592 \times 10^7$	0
2	0	$2,20902 \times 10^7$
3	$-5,82745 \times 10^7$	0

Table 3 shows the mass rate indexes, the mass rate and the upstream and downstream nodes.

Table 3 - Mass rate indexes

mass rate index, its value [ton/h] and upstream and downstream nodes [$node_u$ - $node_d$]					
1	83,34 [7 -10]	6	83,34 [4 - 14]	11	7,026 [12 - 8]
2	83,34 [5 - 6]	7	83,34 [10 - 1]	12	83,34 [14 - 5]
3	7,026 [9 - 11]	8	7,026 [13 - 2]	13	7,026 [11 - 4]
4	7,026 [2 - 12]	9	76,31 [13 - 3]	14	76,31 [3 - 4]
5	83,34 [1 - 13]	10	83,34 [6 - 7]	15	7,026 [8 - 9]

CONCLUSIONS

The present algorithm allows calculation of the operation variables for any thermal system, as such, the new values for the variables, when the system operation is modified.

It can be apllied to heating and cooling plants. The indexes of mass rate are generated upstream and downstream of each node, with base on the index of mass rate vectors.

The values of thermodynamic properties are in good agreement with the values presented in program **EES**.

AKNOWLEDGMENTS

This research was performed under the auspices of the CNPq, Proc. n. 520163/93-1 (RE). I would like to thank Dr. Marc Mulkens for his help.

REFERENCES

Collier, G. C., 1972, "Convective Boiling and Condensation", McGraw-Hill.

Evans, L. B., Steward, D. G. and Sprague, C. R., 1968, "Computer-aided Chemical Process Design, Chem. Engr. Prog., vol. 64, pp. 39-46.

Klein, S. A. and Alvarado, F. L., 1992, "EES-Engineering Equation Solver", F. Chart Software.

Reynolds, W. C., 1979, "Thermodynamic Properties in SI", Stanford University.

Stoecker, W. F., 1971, "A Generalized Program for Steady-State System Simulation", ASHRAE Trans., vol. 77, pp. 140-148.

ANÁLISE ECONÔMICA DE CICLOS COM TURBINAS A GÁS UTILIZANDO BIOMASSA GASEIFICADA

Luis A. Bortolaia
UNIVERSIDADE REGIONAL DO NOROESTE DO ESTADO DO RS
Departamento de Tecnologia
Ijuí - RS

Luiz A. Horta Nogueira - Marco A. R. Nascimento
ESCOLA FEDERAL DE ENGENHARIA DE ITAJUBÁ
Instituto de Engenharia Mecânica
Itajubá - MG

RESUMO

O desenvolvimento de ciclos térmicos com turbinas a gás utilizando biomassa gaseificada tem tornado esta tecnologia uma efetiva opção para os países que dispõem de condições adequadas para a produção sustentável de combustíveis de origem fotossintética. No presente trabalho, baseando-se no estudo termodinâmico de ciclos com gaseificadores pressurizados, se apresentam estimativas de custos de investimento (US$/kW) e de energia gerada (US$/kWh) para quatro configurações: ciclo simples, ciclo com injeção de vapor, ciclo com injeção de vapor e resfriamento intermediário no compressor e ciclo combinado. Os resultados são apresentados considerando distintos cenários de taxas de desconto, preços de combustível e fatores de capacidade, indicando preliminarmente a viabilidade da implantação desta tecnologia no contexto brasileiro.

INTRODUÇÃO

O significativo desenvolvimento de ciclos térmicos com turbinas a gás utilizando biomassa gaseificada tem permitido considerar esta concepção de sistemas de conversão termelétrica como uma oportunidade concreta para países que dispõem de condições adequadas para a produção sustentável de combustíveis de origem fotossintética. No presente trabalho, baseando-se em modelagens termodinâmicas e simulações efetuadas pelos autores, que permitiram determinar as condições de projeto de melhor desempenho em sistemas com gaseificadores pressurizados, se apresentam estimativas de custos de investimento e de energia gerada para quatro configurações destes ciclos: ciclo simples, ciclo com injeção de vapor, ciclo com injeção de vapor e resfriamento intermediário no compressor e ciclo combinado. Os resultados são apresentados considerando distintos cenários de preços de combustível e fatores de capacidade, indicando preliminarmente a viabilidade da implantação desta tecnologia no contexto brasileiro.

CICLOS COM BIOMASSA GASEIFICADA

A seguir serão apresentadas as principais tecnologias com turbinas a gás para aplicações com biomassa, sugeridas por Williams & Larson (1993). São elas:

- ciclo simples de turbina a gás (CS);
- turbina a gás com injeção de vapor (STIG);
- turbina a gás com injeção de vapor e resfriamento intermediário (ISTIG);
- ciclo combinado com turbina a gás e a vapor (CC).

Estes ciclos, que serão sucintamente apresentados a seguir, foram modelados, simulados e comparados em seu desempenho, sendo os resultados obtidos apresentados adiante. Existem outros ciclos sugeridos para as aplicações com biomassa, como o ciclo bottoming a ar, empregando turbinas a ar aquecido indiretamente, para o quais não se prevê significativa potencialidade nos próximos anos e portanto não serão considerados no presente trabalho. A adoção de gaseificadores pressurizados corresponde à opção de melhor desempenho, embora também possam ser usados gaseificadores atmosféricos.

Ciclo simples de turbina a gás (CS). Este é o mais simples de todos os ciclos que serão abordados. A Figura 1 mostra a queima do combustível com o ar comprimido pelo compressor. Os gases produtos da combustão a alta temperatura expandem-se na turbina gerando eletricidade. Os gases de exaustão, que se encontram a uma determinada temperatura, em função das condições de concepção da turbina, são usados em uma caldeira de recuperação para produzir apenas o vapor necessário à gaseificação e/ou para aplicação em processo.

Turbina a gás com injeção de vapor (ISTG). O ciclo de turbina a gás com injeção de vapor (STIG, 'Steam Injected Gas Turbine'), apresentado na Figura 2, é uma variação do ciclo simples de turbina a gás visto anteriormente. O vapor produzido na caldeira de recuperação é injetado no ar de descarga do compressor, aumentando assim o fluxo de massa através da turbina e também o calor específico a pressão constante dos gases dos produtos da combustão, pois o calor específico da mistura ar-vapor é superior ao do ar somente. Como a injeção de vapor foi feita na descarga do compressor, o trabalho de compressão não será afetado. A injeção de vapor na câmara de combustão de turbinas a gás possibilita um aumento da potência elétrica e da eficiência do ciclo, além de reduzir o nível de emissão de NOx (Larson & Williams, 1990).

Turbina a gás com injeção de vapor e resfriamento intermediário (ISTIG). Em uma versão avançada da turbina a gás com injeção de vapor, apresentada anteriormente, se incorpora um resfriador intermediário no compressor. Esta turbina a gás com injeção de vapor e resfriamento intermediário (ISTIG, 'Intercooled Steam Injected Gas Turbine') é mostrada na Figura 3. O resfriamento permite a redução da potência consumida pelo compressor, uma vez que a temperatura de entrada no segundo compressor será reduzida até uma temperatura próxima à temperatura do ar ambiente, mantendo-se a mesma relação de pressão total. Devido a esta diminuição da potência requerida pelo compressor, o ciclo ISTIG possibilita o aumento da potência elétrica e da eficiência.

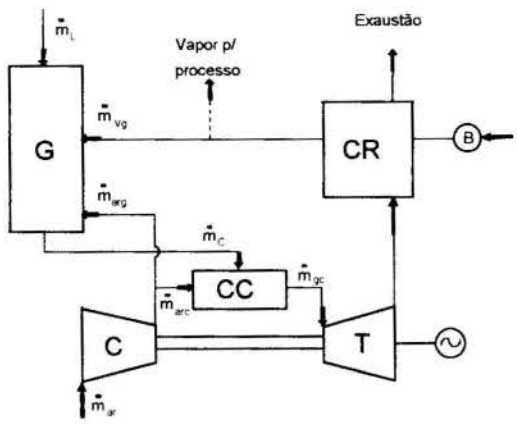


Figura 1 - Ciclo simples de turbina a gás

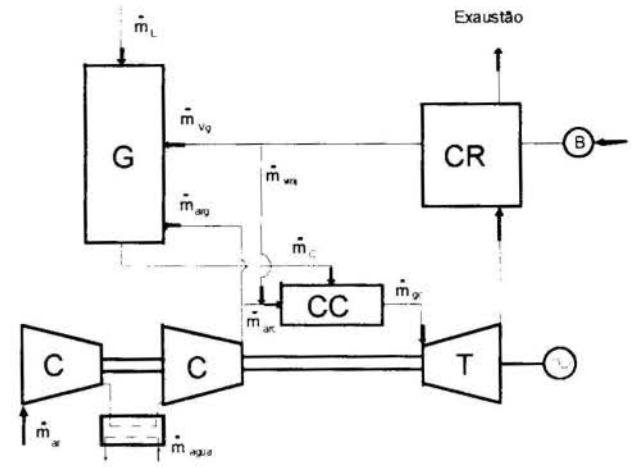


Figura 3 - Ciclo de turbina a gás com injeção de vapor e resfriamento intermediário

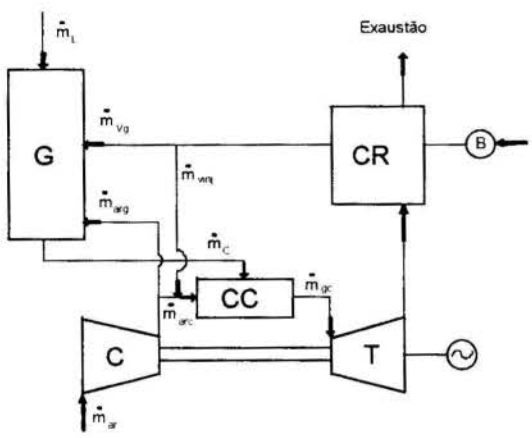


Figura 2 - Ciclo de turbina a gás com injeção de vapor

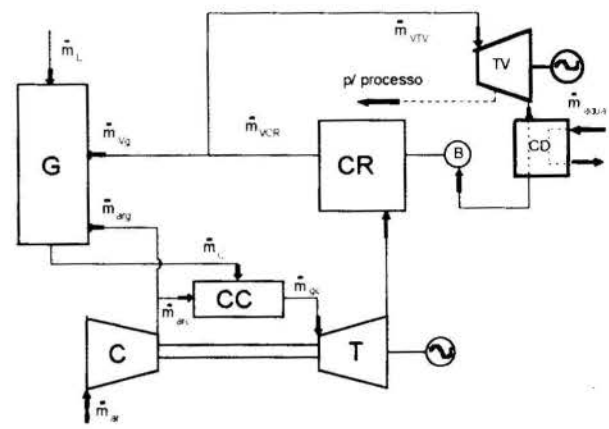


Figura 4 - Ciclo combinado: turbina a gás e turbina a vapor

Ciclo combinado - turbina a gás e turbina a vapor (CC). A combinação de uma turbina a gás com uma turbina a vapor é denominada ciclo combinado, como mostra a Figura 4. Neste ciclo, o vapor produzido nacaldeira de recuperação é utilizado para a geração de potência adicional em um ciclo com turbina a vapor, da qual vapor pode ser extraído para aplicação em processo. Para configurações de porte análogo, este ciclo apresenta potência aproximadamente igual à de um ciclo com injeção de vapor, porém com maior eficiência.

ASPECTOS ECONÔMICOS

O equacionamento a seguir permite a análise dos custos associados aos ciclos de potência com turbinas a gás empregando biomassa gaseificada, apresentando relações de custo para investimento e expectativas de custo de energia gerada, em cenários correspondentes a situações típicas. Esta análise deve ser considerada como uma estimativa preliminar, uma vez que a determinação exata destes custos só pode ser efetuada com precisão diretamente com fornecedores de equipamentos e mesmo assim após a efetiva implantação de um projeto.

Relações fundamentais de custo. Apresenta-se a seguir as relações adotadas para a estimativa do custos associados a estas tecnologias, sendo abordados os custos de investimento, operação e manutenção e o custo do combustível.

1 - Custo de investimento, operação e manutenção: O custo unitário de investimento, operação e manutenção (US$/MWh) pode ser expresso por:

$$C_{inv,om} = (1 + C_{om}) \frac{C.FRC}{P.H.FC} \qquad (1)$$

onde:

- C_{om} = custo relativo anual de operação e manutenção, dado como função do investimento total da planta. Este custo será admitido como sendo 2% do custo total do investimento;
- C = custo de investimento, (US$);
- FRC = fator de recuperação de capital, (-);
- P = capacidade ou potência elétrica da instalação, (MW);
- H = número de horas do ano, 8760 h;
- FC = fator de capacidade, dado pela fração do tempo anual em que a planta é operada, (-).

O custo de investimento, tipicamente uma função da tecnologia adotada e nível de desempenho da planta, é a soma do custo dos diversos equipamentos que compõem a planta,

Tabela 1 - Custos de investimento adicionais como função dos custos dos equipamentos, (Craig, 1994).

item	investimento em equipamentos (%)
Instalação	15
Tubulação	45
Instrumentação	10
Obras Civis e infra-estrutura	10
Sistemas Auxiliares	25
Subestação elétrica	10
Total	115

Tabela 2 - Custo unitário da lenha em Estados do Nordeste brasileiro, (Carpentieri, 1993)

Estado	Custo ($/GJ)
Alagoas	1.98
Bahia	2.14
Ceará	2.24
Maranhão	1.97
Paraíba	2.15
Pernambuco	2.37
Piauí	2.27
Rio Grande do Norte	2.48
média	2.18

acrescidos todos os custos de implantação. Estes custos podem ser considerados como uma função do investimento em equipamentos, sendo apresentados na Tabela 1, conforme Craig (1994).

Desta forma, os custos globais de investimento em uma planta utilizando biomassa gaseificada podem ser estimados pela seguinte expressão:

$$C = 2{,}15 \sum_{comp} C_{comp} \qquad (2)$$

Por sua vez, o custo dos equipamentos componentes de plantas térmicas pode ser estimado a partir da equação a seguir, apresentada por Bohem (1987):

$$C_{comp} = C_R \left(\frac{S}{S_R}\right)^m \qquad (3)$$

onde:

C_R = custo do equipamento de referência; válido para uma capacidade de referência S_R;
S = capacidade do equipamento;
m = fator de escala, correlacionando o custo e o porte do equipamento.

Os valores do custo do equipamento de referência, da capacidade de referência e do fator de escala podem ser obtidos de Bohem (1987) e Nogueira (1993).

A metodologia apresentada anteriormente não inclui o gaseificador de biomassa, cujo custo deve ser estimado de outra forma. Uma vez que não pode-se considerar disponível, no momento, estimativas confiáveis para o custo de sistemas de gaseificação em diversas potências, adotou-se, visando estimar o custo da energia gerada em diversas configurações de ciclos, o valor apresentado por Walter e Llagostera (1994), 7.900 mil US$, válido para um gaseificador pressurizado de uma planta com capacidade de 60 MW. Segundo estes mesmos autores, o custo da caldeira de recuperação pode ser calculado como uma percentagem do custo da turbina a gás, percentagem esta em torno de 17%.

Da mesma forma, não foi possível discriminar os custos de uma turbina a gás com resfriamento intermediário. Entretanto, avaliações dos custos globais para ciclos BIG-STIG com turbinas deste tipo, apresentadas por Consonni e Larson (1994), indicam valores inferiores aos valores correspondentes aos ciclos BIG-STIG básicos. Assim, de modo conservador, adotou-se para as turbinas com intercooler custos similares às máquinas convencionais, admitindo de certo modo que os custos adicionais associados ao trocador de calor seriam compensados pela compactação do estágio posterior de compressão e pelo ganho de potência. Adiante, na comparação entre os ciclos, estes custos serão apresentados.

O fator de recuperação de capital, que é uma função da taxa de juros considerada e do período de amortização, geralmente adotado igual ao tempo de operação da planta, permite transformar o investimento em uma série de pagamentos anuais, pela conhecida equação a seguir:

$$FRC = \frac{i}{(1-(1+i)^{-n})} \qquad (4)$$

com:

i = taxa de juros, (% a.a.);
n= vida prevista para a planta, (anos).

2 - Custo do combustível: O custo unitário do combustível utilizado para a geração de energia elétrica depende do desempenho da planta e do custo unitário, em base térmica, do combustível utilizado, e em termos de (US$/MWh), pode ser dado por:

$$C_{comb} = \frac{3{,}6.L_{comb}}{\eta_c} \qquad (5)$$

onde:

L_{comb} = preço do combustível, (US$/GJ);
η_c = eficiência térmica do ciclo, (-).

Como uma referência dos valores de custo a considerar para a biomassa, tem-se a Tabela 2 (Carpentieri, 1993), apresentando o custo médio de produção da lenha para o mercado brasileiro, tendo sido considerado o eucalipto com umidade de 33%. Este custo pode variar bastante em função da localização e da escala de produção, e seu acompanhmento em séries históricas é sempre oportuno, como apresentado por La Rovere e Nogueira (1994).

3 - Estimativa do custo da energia gerada: Considerando o exposto anteriormente, o custo unitário da energia gerada pode ser expresso por:

$$C_{EG} = (1 + C_{om}).\frac{C.FRC}{P.H.FC} + \frac{3{,}6.L_{comb}}{\eta_c} \qquad (6)$$

Como situação base para a análise dos custos da energia gerada, foram adotados os valores da Tabela 3, que apresenta os valores utilizados para o cálculo estimativo do custo da energia gerada e de um estudo de sensibilidade.

Os valores utilizados para a eficiência nas diversas configurações consideradas para os ciclos de potência estudados refletem o melhor valor calculado para três casos de temperatura máxima de ciclo considerada (1200, 1400 e 1600 K), conforme mostra a Tabela 4, deixando portanto como variável livre neste

caso a relação de pressão na turbina a gás (Nogueira et al., 1995). Tal seleção apoia-se no pressuposto de que a temperatura máxima em um ciclo é uma limitação tecnológica e determina a relação de pressão a ser adotada visando o máximo desempenho.

COMPARAÇÃO ENTRE OS CICLOS

A seguir, apresenta-se os principais resultados obtidos para os ciclos, em termos de custo por energia gerada e por capacidade instalada. A Tabela 5 apresenta o custo da energia elétrica gerada (US$/MWh) para um valor máximo de fator de recuperação de capital (FRC=0,1710), que corresponde a uma taxa de juros de 15% a.a e uma vida da planta de 15 anos. Considerou-se ainda um fator de capacidade de 80% e o preço da biomassa como sendo 2,18 US$/GJ. A Tabela 6 apresenta também o custo da energia elétrica gerada, mantendo as mesmas variáveis consideradas na Tabela 5, com exceção do preço da biomassa, para o qual se assumiu um valor de 3,5 US$/GJ. Estes valores de biomassa representam respectivamente a média dos custos observados no Nordeste brasileiro e o valor tipicamente observado em Minas Gerais. No sentido de se reduzirem os custos da energia gerada, fica evidente a importância de se assegurar um suprimento de combustível a baixos preços e operar com turbinas de última geração, capazes de suportar elevadas temperaturas em seus estágios iniciais. Em termos destes resultados, os ciclos mais complexos parecem permitir a geração de energia elétrica sob menores custos, entretanto com a notável exceção dos ciclos combinados, cujos resultados neste sentido são similares aos do ciclo mais simples.

Vale observar ainda a grande variação que resulta nos custos da energia produzida em decorrência de adotar-se um valor maior ou menor para a taxa de juros ou de desconto, cujo valor em princípio deve ser estimado em uma ampla faixa. Existe assim, a necessidade de se arbitrar taxas de juros ou de desconto que possam ser consideradas factíveis ou correspondentes ao valor efetivo de mercado para os recursos financeiros, aspectos também sujeitos aos eventuais mecanismos creditícios.

A variação do custo da energia gerada em função do fator de capacidade FC, para uma temperatura escolhida (T=1400 K) é mostrada nas Figuras 5 e 6, para dois valores de custo de combustível.

Os custos globais de investimento para as configurações estudadas foram estimados, baseando-se nas seguintes premissas:

- o gaseificador possuirá sempre um custo constante;
- a turbina a gás, cuja potência foi fixada em 30 MW, também terá um custo constante;
- o custo da caldeira de recuperação foi calculado como um percentagem do custo da turbina a gás;
- o custo da turbina a vapor depende da massa de vapor, sendo variável com a temperatura;
- o custo do condensador depende também da massa de vapor, sendo portanto variável.

Os custos de investimento do ciclo simples, STIG e ISTIG, foram considerados como sendo 42.480 mil US$, baseando em informações da literatura (Consonni e Larson,1994). No caso de ciclo combinado estes custos variam bastante em função desua temperatura máxima, sendo estimados em 1809, 1705 e 1758. US$/kW para as temperaturas na entrada da turbina de 1200, 1400 e 1600 K, respectivamente.

COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES

Este trabalho apresentou uma avaliação de ciclos empregando biomassa gaseificada em turbinas a gás, considerando quatro configurações com gaseificador pressurizado. Foram desenvolvidos estudos de sensibilidade do custo da energia gerada frente a variações de alguns parâmetros relevantes como o custo do combustível e o fator de capacidade , efetuados a partir de das configurações de melhor desempenho, definidas em modelagem termodinâmica preliminar, indicando uma efetiva potencialidade destes ciclos para as condições brasileiras, cujo Setor Elétrico indica custos marginais de expansão da ordem de 60 US$/MWh.

Maiores esforços devem ser dirigidos ao estudo destas configurações operando em condições fora do ponto de projeto e especialmente buscando modelar o impacto de distintas concepções de gaseificadores de biomassa.

Tabela 3 - Cenários considerados para o estudo de sensibilidade dos custos de energia

variável	símbolo	valores
custo relativo de O&M	C_{OM}	0,02
taxa de desconto	i	5, 10 e 15%
vida útil da planta	n	15 e 20 anos
fator de capacidade	FC	50, 60, 70, 80 %
custo do combustível	I_{comb}	2,18 e 3,5 US$/GJ
capacidade instalada	P	30 MW

Tabela 4 - Valores adotados para a eficiência do ciclo em função da Temperatura de Entrada na Turbina (TET)

Ciclo	TET (K)		
	1200	1400	1600
Simples	0,2977	0,3690	0,3925
STIG	0,3641	0,4569	0,5875
ISTIG	0,3535	0,4297	0,5554
Combinado	0,4490	0,5240	0,5740

Tabela 5 - Resultados do custo da energia elétrica gerada considerando Lcomb= 2,18 US$/GJ

Ciclo	TET (K)		
	1200	1400	1600
Simples	61,60	56,52	55,24
STIG	56,80	52,42	48,60
ISTIG	57,44	53,51	49,37
Combinado	62,52	57,43	57,43

Tabela 6 - Resultados do custo da energia elétrica gerada considerando Lcomb= 3,5 US$/GJ

Ciclo	TET (K)		
	1200	1400	1600
Simples	77,56	69,39	67,34
STIG	69,85	62,82	56,69
ISTIG	70,88	64,56	57,93
Combinado	73,10	66,49	65,71

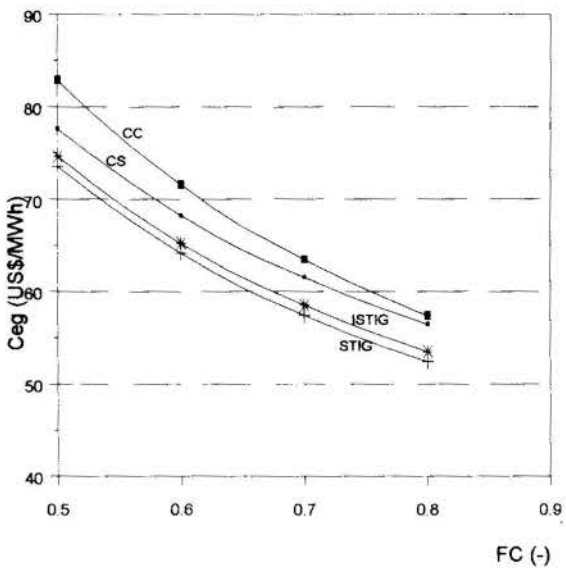


Figura 5 - Custo da energia elétrica gerada em função do fator de capacidade para L_{comb}=2,18 US$/GJ

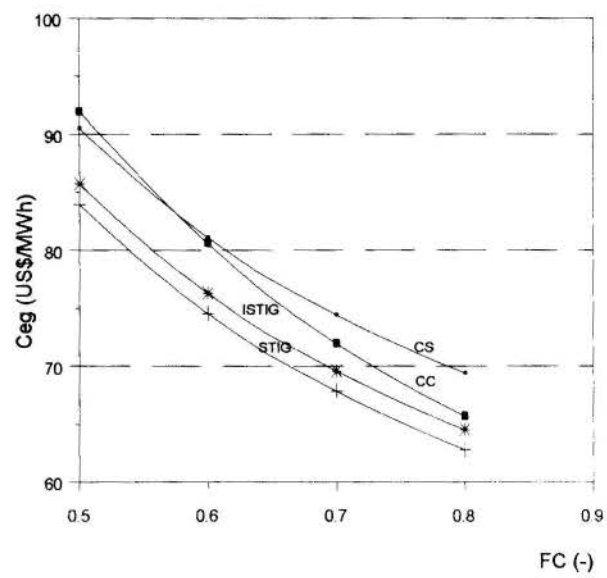


Figura 6 - Custo da energia elétrica gerada em função do fator de capacidade para Lcomv=3,5 US$/GJ

REFERÊNCIAS

Bohem,R.F., Design Analysis of Thermal Systems, Wiley, New York, 1987.

Carpentieri, A.E ,"Future biomass-based power generation in Northeast Brazil", *Biomass and Bioenergy*, 4(3), 1993.

Consonni,S.;Larson,E.D,"Biomass-Gasifier Aeroderivative Gas Turbine Combined Cycles: Part B-Performance Calculations and Economic Assessment", ASME COGEN-TURBO, IGTI-vol. 9, 1994.

Craig,K.R., "Cost and Performance Potential of Advanced Integrated Biomass Gasification Combined Cycle Power Sistems", ASME COGEN-TURBO, IGTI-vol. 8, 1994.

La Rovere,E.L. ; Nogueira,L.A.H. "Fuelwood and Charcoal Costs and Prices: evolution and trends in Brazil", VIII European Conference on Biomass for Energy, EEC,1994

Larson,E.D.; Willians,R.H., Biomass-Gasifier Steam-Injected Gas Turbine Cogeneration, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol.112, ASME, New York, 1990

Lundberg, M., "Latent Heat utilization in Steam-Injected Gas Turbine Applications", ASME COGEN-TURBO, IGTI-vol. 6, 1991.

Nogueira, L.A.H., Estimativa de Custos em Sistemas de Cogeração, EFEI, 1993.

Nogueira,L.A.H.; Bortolaia,L.A.; Nascimento,M.A.R., "Ciclos Térmicos com Biomassa Gaseificada: configurações e desempenho", XIII Seminário Nacional de Produção e Transmissão de Energia Elétrica, ELETROSUL/CIGRE,Camboriú, 1995

Walter,A.C.;Llagostera,J., "Exergetic and Thermoeconomic Analysis of Biomass Integrated Gasifier/Gas Turbine Power Systems", ASME COGEN-TURBO, IGTI-vol. 8, 1994.

Willians,R.H.; Larson,E.D.,"Advanced-Gasification based Biomass Power Generation", in Renewable Energy: Sources for Fuels and Electricity (ed. Johansson,T.B.; Kelly,H.; Reddy,A.K.N.; Willians,R.), Island Press, Washington, 1993

ABSTRACT

The development of gas turbine cycles fuelled by gasified lignocelulosic materials is worthy for countries whose biomass production can be done in competitive and sustainable basis. In this paper, using previous results from a thermodynamic simulation, it is analysed the economic aspects of four configurations of cycles, in order to determine unitary capacity cost (US$/kW) and specific energy cost (US$/kWh). It is assumed a pressurised biomass gasifier, using air and steam for grate cooling. The results have shown good potential for this energy conversion technology, which present costs competitive with the marginal cost of capacity in Brazil, around 60 US$/MWh. As it could be expected, feasibility seems be better for more complex cycles, with high performance gas turbines, low prices of biomass and for power plants operating at elevated capacity factor.

REPRESENTATION OF THERMOFLUID SYSTEMS USING TRUE BOND-GRAPHS

Claudio Olivera-Fuentes[1] and Marisol Delgado[2]
[1]Thermodynamics and Transport Phenomena Department,
[2]Processes and Systems Department
Simon Bolivar University
AP 89000, Caracas 1086-A, Venezuela

SUMMARY

The traditional BondGraph representation of thermodynamic systems and processes is reviewed. Inconsistent use of basic thermodynamic principles is shown to be a leading factor in the generation of the nonrigorous structures known as pseudo-BondGraphs. New BondGraph elements (mixer and neutral junctions, travelling R-fields and thermodynamic capacitor fields) are proposed, and their constitutive laws and causal structures are discussed. Definition of these elements avoids the inconsistencies of previous treatments, and results in true BondGraph representation of thermofluid phenomena.

INTRODUCTION

Thermodynamics constitutes a particularly challenging field for BondGraph (BG) modelling. Power transfer occurs across several energy domains, including most importantly the thermal domain, which cannot simply be left out of the analysis. The "system" (Lagrangian) description typical of classical thermodynamics, characterized by static fundamental laws and constitutive equations in terms of lumped parameters, is in conflict with the "control volume" (Eulerian) approach of continuum mechanics, based on dynamic conservation laws or balance equations in terms of distributed parameters, related by postulates of local equilibrium. The BG representation of thermofluid systems and processes has therefore traditionally involved special considerations, *e.g.* the relaxation of certain basic rules, and has typically resulted in the semi-rigorous structures known as *pseudo-BondGraphs*. It is the purpose of the present paper to review briefly the usual BG approach to thermodynamic problems, to identify its inconsistencies and shortcomings, and to show how it can be modified to bring it back into the standard methodology of *true* BondGraph analysis.

REVIEW OF BONDGRAPH FUNDAMENTALS

BondGraphs are graphical representations of the energy interactions within a system (Karnopp *et al.*, 1990; Thoma, 1990; Sharpe, 1993). System components are represented as lumped *elements*, identified by letter codes rather than icons. Interaction between elements is expressed in terms of pairs of *energy covariables*: an *effort* (driving force) and a *flow* (transport flux), the product of which is energy rate or *power*. Different *energy domains* are characterized by appropriate effort and flow variables, as shown in Table 1.

Interactions are represented graphically by a *bond* or line drawn between the elements; this is normally *augmented* by adding two types of *computational marks*: the *power stroke*, a half arrow that denotes the *sign convention* or assumed direction of positive energy flow, and the *causal stroke*, a short perpendicular line at the bond end closer to the element on which the effort is exerted. Bonds in a complicated BG may also be *labelled* with numbers for easy reference. Figure 1 is a BG representation of the possible interactions between two generic elements A and B.

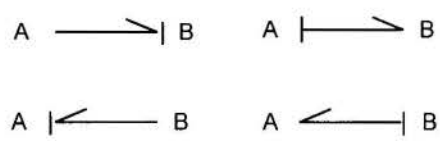


Figure 1. Possible interactions between two elements.

Causality is a fundamental concern of BG analysis. On each bond, one of the elements generates ("computes") the effort signal and applies it as an input on the other element, identified by the causal stroke; this replies by generating ("computing") the flow signal as an output, and sending it back to the first element. Each element is defined by a specific set of *constitutive equations* prescribing the mathematical relations between efforts and flows. The propagation of efforts and flows across the entire BG network will imply not only the cause-and-effect relationships within the system, but also the computational sequence (or even the feasibility) of solution of the system model.

The BG method seeks to represent the common structure and behaviour of all energy systems. To this end it makes useof *standard* elements, basic building blocks referred to in general as *multiports* and classified as shown in Table 2. A brief description of the standard elements is given below.

Table 1. Energy covariables for different disciplinary energy domains

Domain	Effort (e)	Flow (f)	Momentum (p)	Displacement (q)
Mechanical				
Translational	Force	Velocity	Linear momentum	Displacement
Rotational	Torque	Angular velocity	Angular momentum	Angle
Hydraulic	Pressure	Volume flow rate	"Pressure momentum"	Volume
Electric	Voltage	Current	Flux linkage variable	Charge
Thermal	Temperature	Entropy rate		Entropy
Thermofluid	Enthalpy	Mass flow rate		Mass

One-port elements. *Sources* are idealized versions of supplies. An *effort source* impresses an effort on a system, independently of the flow or power required; a *flow source* supplies a flow to a system independently of the effort or power involved. Sign conventions and mandatory causalities are depicted in Table 2.

Resistors dissipate power, *i.e.* they irreversibly (in the thermodynamic sense) convert high-grade energy into thermal energy. Their standard representation in a nonthermal domain shows only the power input to the element, ignoring the equivalent thermal power output. Causality is largely indifferent. For *linear* resistors, the constitutive coefficients are the *resistance* $R = e/f$ and the *conductance* $G = f/e$.

Capacitors store energy by accumulating flow. Their constitutive equation may be exhibited as a *dynamic* (unsteady-state) relation between f and de/dt, or more usually as a *static* (algebraic) relation between e and the time integral of flow, known as *displacement* q,

$$q \equiv \int f(t)dt \tag{1}$$

The usual sign convention shows power flow into the element. *Integral causality*, effort as a function of displacement, is the preferred choice for computational applications, since numerical integration is more accurate than the differentiation required by the alternative *derivative causality*. Capacitors are reversible elements; energy is stored as *potential energy*, and can be recovered without loss:

$$E = E_0 + \int e(t)f(t)dt = E_0 + \int e(q)dq \tag{2}$$

e.g.. in the linear case

$$E = E_0 + \int \frac{1}{C} q dq = E_0 + \frac{1}{2C}\left(q^2 - q_0^2\right. \tag{3}$$

where the constitutive parameter C is the *compliance*.

Inertias are similar to capacitors, but their constitutive equation is a dynamic relation between e and df/dt, or a static relation between f and *momentum* p, defined as the time integral of effort:

$$p \equiv \int e(t)dt \tag{4}$$

The energy stored by accumulating effort is *kinetic energy*,

$$E = E_0 + \int f(t)e(t)dt = E_0 + \int f(p)dp \tag{5}$$

e.g. in the linear case

$$E = E_0 + \int \frac{1}{I} p dp = E_0 + \frac{1}{2I}\left(p^2 - p_0^2\right. \tag{6}$$

Integral causality (flow as a consequence of momentum) is again the preferred choice.

Two-port elements. These conserve power according to the energy balance $e_1 f_1 = e_2 f_2$, while altering the effort and flow characteristics. *Transformers* may either translate power flow into a different energy domain (*class* transformers) or change the effort/flow ratio within the same domain (*impedance* transformers). The *transformer modulus m* may be a constant, or more generally a variable signal transmitted to the transformer (which is then said to be *modulated*) along an *activated* bond, *i.e.* a bond carrying information at virtually zero power flow. The accepted sign convention shows power coming into one port and flowing out of the other. Only two causalities are possible, because if either e_1 or e_2 is imposed on the element, the constitutive relation fixes the other effort.

Gyrators, also known as *crossover transformers*, may be seen as the *dual* elements of transformers. They are in fact more fundamental in nature, in that they might be used to dispense entirely with other elements, *e.g.* two gyrators in series are equivalent to a transformer, and a gyrator in series with an inertia is equivalent to a capacitor. Since this replacement of one element by a combination of two elements complicates rather than simplifies the BG, the one-ports and two-ports described above are retained for simplicity's sake.

Three-port elements. These are also called *junctions*. They are power conserving, reversible elements for interconnection of other multiports into subsystem or system models. *Parallel junctions*, also known as *common effort* or *0 (zero)-junctions*, split flow into (or collect it from) two or more channels, but the effort is the same on all bonds. Sign convention will reflect the true direction of power flow; the arbitrary example in Table 2 shows all power transmission directed into the junction. Mandatory causality follows from considering that if any one effort (*e.g.* e_1) is imposed on the junction, then all remaining efforts are fixed by the constitutive equation, *i.e.* they are computed by the junction and sent out.

Series junctions are also known as *common flow* or *1 (one)-junctions*. They are the dual of the above, splitting effort into (or adding it up from) several channels, but with a common flow on all bonds. Table 2 shows a sign convention with all power flows directed into the element. Causality requires that all efforts except one (*e.g.* e_n) be imposed on the junction before it can compute that last effort by difference and send it out.

Multiport elements. Known also as *fields*, these are generalizations of certain one-ports. They may appear in the BG as *explicit fields*, defined from the start as a set of constitutive relations for a subsystem with two or more ports. It may also happen that a particular BG structure built as an assembly of 1-ports, 2-ports and junctions can usefully be treated as a single subsystem, referred to as an *implicit field*.

C-fields reversibly store energy as a sum of accumulated flows contributed by two or more bonds:

$$E = E_0 + \int \sum_i e_i f_i dt = E_0 + \int \sum_i e_i dq_i \tag{7}$$

Constitutive laws are written as a set of static, possibly nonlinear equations in terms of efforts and displacements. Causality may appear in a number of forms. *Stiffness* (integral) causality computes all efforts from a knowledge of all displacements; the opposite is done by *compliance* (derivative) causality. Mixed causal forms are also possible, and choice of a preferred form is limited only by the practical requirement that the constitutive equations can be solved. The existence of a stored energy function also imposes constraints on the acceptable constitutive laws, which must obey the *generalized Maxwell relations*

$$\frac{\partial^2 E}{\partial q_i \partial q_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial q_j \partial q_i} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial e_j}{\partial q_i} = \frac{\partial e_i}{\partial q_j} \tag{8}$$

e.g. in the linear case the stiffness and compliance matrices must be symmetric.

I-fields are analogous to C-fields, but they store energy by accumulating efforts from two or more bonds. Their constitutive relations are therefore a set of static, possibly nonlinear equations involving flows and momenta. They are reversible and possess a stored energy function with Maxwell symmetry,

$$E = E_0 + \int \sum_i f_i e_i dt = E_0 + \int \sum_i f_i dp_i \tag{9}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_j \partial p_i} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial e_j}{\partial p_i} = \frac{\partial e_i}{\partial p_j} \tag{10}$$

A useful generalization is the *IC-field*, a structure that operates as a flow-accumulating C-field on bonds connected to its *capacitive* ports, and as an effort-accumulating I-field at its *inertial* ports. The stored energy function and its symmetry properties are easy to deduce from those of both types of field.

R-fields are described by static constitutive laws that relate efforts and flows on two or more bonds. This definition might in fact include the basic s- and p-junctions, as well as certain combinations of elements and sources, but the distinguishing feature of R-fields is their occurrence as power dissipators (actually converters of nonthermal to thermal power). The constitutive relations may be exhibited in *resistance* (effort-explicit), *conductance* (flow-explicit) or *mixed* causality, none of which is in principle preferable. Since R-fields have no stored energy function, Maxwell relations cannot be derived for their phenomenological coefficients. Karnopp *et al.* (1990) and Thoma (1990) nevertheless state that *implicit* R-fields will, depending on their internal structure, obey *Onsager reciprocal relations*, *i.e.* symmetric conductance and resistance matrices, or *Casimir relations*, *i.e.* anti-symmetric matrices. *Explicit* R-fields, on the other hand, do not seem to be constrained by any particular requirement of symmetry or anti-symmetry.

Multiport p- and *s-junctions* are straightforward generalizations of the basic three-ports elements. In fact, direct connection of two three-ports of equal type generates the corresponding four-port version, which is thus a simpler representation of the combined subsystem. Two-port junctions, on the other hand, collapse to a simple bond.

BOND-GRAPH ANALYSIS OF THERMODYNAMIC SYSTEMS AND PROCESSES

Systems. Gibbs' fundamental equation for thermodynamic systems is readily interpreted in BG terminology. In fact, it can be seen from the above review that the concepts of stored energy and Maxwell symmetry of conservative fields are strongly based on classical thermodynamics. Thus, a pure substance can be represented as a C-field with integral causality (Karnopp *et al.*, 1990; Thoma, 1990) as shown in Figure 2a, with constitutive equations

$$T = T(\int \dot{s} dt, \int \dot{v} dt) \quad , \quad P = P(\int \dot{s} dt, \int \dot{v} dt) \tag{11}$$

and stored (*internal*) energy function *per unit mass*

$$\frac{du}{dt} = T\dot{s} - P\dot{v} \tag{12}$$

It must be noted that the BG flow variables $\dot{s}$ and $\dot{v}$, and the "dot" notation at this stage, stand not for transport flows, but for

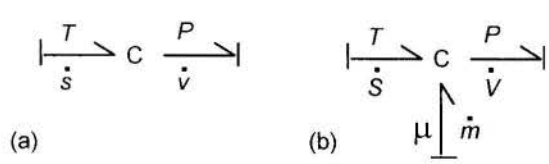


Figure 2. C-fields for closed and open systems

time derivatives of state quantities. This standard notation is unfortunate, as it will tend to create confusion when true physical flows are introduced later on. An additional comment on the above representation is that it involves a notion of time dependence that is foreign to thermodynamics. The Gibbs fundamental equation is a static relation among instantaneous values of the equilibrium properties, whereas Eq. (12) might for time-dependent properties be taken to imply the incorrect energy formula

$$u = u_0 + \int_0^t \left[T(\theta)\dot{s}(\theta)d\theta - P(\theta)\dot{v}(\theta)d\theta \right] \tag{13}$$

instead of the correct one,

$$u = u_0 + T(t)\int_0^t \dot{s}(\theta)d\theta - P(t)\int_0^t \dot{v}(\theta)d\theta$$

$$= T(t)s(t) - P(t)v(t) \tag{14}$$

The missing element is of course Euler's theorem for homogeneous functions, and its thermodynamic corollary the Gibbs-Duhem relation, which should be made (but is not) an explicit part of BG thermodynamics. This omission does not affect the constitutive laws of Eq. (11), which correctly give $\{T(t), P(t)\}$ as functions of $\{s(t), v(t)\}$ and are all that needs to be specified for modelling and computational purposes.

The above relations are also valid for the specific properties of open systems containing a variable mass of a pure substance. The corresponding total properties, on the other hand, are best computed from the extensive form of the fundamental equation,

$$\{T, P, \mu\} = \Phi\left\{\int \dot{S} dt, \int \dot{V} dt, \int \dot{m} dt\right\} \tag{15}$$

with total stored energy function

$$\frac{dU}{dt} = T\dot{S} - P\dot{V} + \mu\dot{m} \tag{16}$$

$$U = T(t)S(t) - P(t)V(t) + \mu(t)m(t) \tag{17}$$

where μ is the chemical potential. The C-field is now a three-port, as shown in Figure 2b. Extension to multicomponent systems or to systems capable of work interactions outside the hydraulic domain should be straightforward.

Streams. Any material flow is also a flow of convected energy. An Eulerian observer, fixed to the external frame of reference, sees matter entering upstream and leaving downstream at a mass flow rate $\dot{m}$, and carrying with it a net flow rate of convected internal energy $u\dot{m}$, which from thermodynamics can be resolved into contributions from power covariables in the thermal, hydraulic and chemical domains,

$$\dot{U} \equiv u\dot{m} = T\dot{S} - P\dot{V} + \mu\dot{m} \tag{18}$$

The joint flow of mass, entropy and volume can be represented by a *vector bond* or *multibond*, defined in general as a group of simple bonds that are in some sense related. A usual graphical representation consists of a bond with a small ring around it. The bond label may indicate the number of *strands* in the multibond, and each strand may further be labelled by adding a letter to the bond number (*e.g.* bond 1 is composed of strands 1a, 1b, 1c,...).

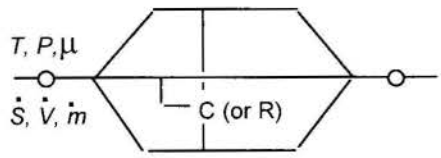


Figure 3. Travelling-field representation of streams.

Thoma (1990) argued that a Lagrangian observer, moving with the material, must still perceive it to behave as a *travelling* C-field that carries its constitutive equations with itself. He unified the Lagrangian and Eulerian viewpoints of the thermodynamic stream by representing the travelling C-field as an internal dependence of the strands of the multibond, as shown in Figure 3. In integral causality, this implies the constitutive relations

$$\{T, P, \mu\} = \Phi\left\{\int \dot{S}\,dt, \int \dot{V}\,dt, \int \dot{m}\,dt\right\} \tag{19}$$

Unfortunately, while these appear to be identical to the C-field laws of Eq. (15), this is only because of the ambivalent use of the dot notation, which is now being employed in its more usual sense of denoting flow variables (not time derivatives of state variables). The fundamental difference between Eq. (15) and (19) is that, for time-dependent flow rates of entropy, volume and mass, the integrals in Eq. (19) do not give the correct instantaneous (present) values of the stream's entropy, volume and mass. Hence Eq. (19) is incorrect, and the model it derives from cannot be accepted. A further argument in this respect is that C-fields, being energy storers, introduce first-order dynamics in a BG (Karnopp *et al.*, 1990); it is illogical that the dynamic order of a system should increase because of the static thermodynamic relations of each material stream in it.

The notion of a travelling C-field is an intuitively appealing one, but it does not seem possible to insert this into a multibond structure without altering the dynamics of the BG or violating the known behaviour of thermodynamic properties. We propose as a simple alternative to represent the thermodynamic stream as a *travelling R-field*, which is the only static standard multiport BG element. In full resistance causality, the constitutive laws are

$$\{T, P, \mu\} = \Phi\left\{\dot{S}, \dot{V}, \dot{m}\right\} = \Phi\left\{\dot{S}/\dot{m}, \dot{V}/\dot{m}\right\} \tag{20}$$

Full conductance causality is forbidden by the Gibbs-Duhem relation, because only two of the intensive variables in the set $\{T, P, \mu\}$ are independent, and can be used to infer only the flow ratios $\dot{S}/\dot{m}$, $\dot{V}/\dot{m}$, not the separate flows. Mixed causalities should be acceptable, if perhaps difficult to solve. A causality close to engineering practice would use $\{\dot{m}, T, P\}$ as data to compute μ, v (hence $\dot{V} = v\dot{m}$) and s (hence $\dot{S}$), but this also becomes indeterminate if T and P define a *saturation state* and the fluid is a two-phase mixture. The independent set $\{T, V, \dot{m}\}$ is possibly the best option for use with the pressure-explicit equations of state that currently dominate the field of thermodynamic property estimation.

The hydraulic power of a stream is entirely spent as mechanical work performed by the pressure force to maintain the flow; the remainder is the enthalpy flow rate or thermofluid power, the only energy that can be transmitted by mass flow:

$$\dot{H} = h\dot{m} = u\dot{m} + P\dot{V} = T\dot{S} + \mu\dot{m} \tag{21}$$

A widespread representation of the thermodynamic stream is therefore a single bond with effort h and flow $\dot{m}$. In this simple but limited view, the two power covariables are insufficient for a complete thermodynamic description of the stream, and must be determined externally. Alternatively, the h-m multibond may be resolved into T-$\dot{S}$ and μ-$\dot{m}$ strands only (a BG by Thoma (1990), purporting to represent a general thermofluid machine or *TEFMA*, erroneously includes a third, P-$\dot{V}$ bond), and a travelling R-field may be used to compute one of the power covariables from the other three, *e.g.* $\dot{S} = s(T, \mu)\,\dot{m}$ or $\mu = \mu\,(T, \dot{S}/\dot{m})$.

Junctions. The limitations of the standard junctions in representing thermodynamic processes, and the consequent need for new junction types have been recognized by previous authors. LeSeur (1980) defined *2-junctions* as reversible elements whose constitutive laws are the steady-state flow and energy balances at the intersection of two or more streams:

$$f_1 + \ldots + f_n = 0 \tag{22}$$

$$e_1 f_1 + \ldots + e_n f_n = 0 \tag{23}$$

i.e. flows are summed and power is conserved, but without the equality of efforts imposed by p-junctions. An obvious example would be the mass and enthalpy balances at a node in a fluid flow manifold, with $f = \dot{m}$, $e = h$, and $e\,f = \dot{H}$.

We propose for these junctions the more descriptive name *mixer*, or *m*-junctions. Since they possess only two constitutive equations, only two covariables can be computed; these cannot both be efforts, for at least one flow must be obtained from Eq. (22). Figure 4a illustrates one of the two possible causal forms. All bonds are shown as possessing *double* (or *dual*) *causality*, which means that the causal stroke refers not only to the effort but to the flow as well, and n-1 streams must be completely defined (by the elements at the other end of the bond) before the junction can compute the flow and effort for the n-th bond. Only one alternative causality is possible, in which two flows are computed.

DeNovellis (1991) similarly introduced *3-junctions* to represent the contribution of power flows not subject to any constraints on efforts or flows, other than the requisite conservation of energy. We prefer to call these *neutral* or *n*-junctions. Their constitutive law is the single Eq. (23); double causality on n-1 bonds is mandatory before the junction can compute either the effort or the flow on the remaining bond (Figure 4b).

Bonds that carry double causality will necessarily affect the causal structures of other BG elements, in particular that of the standard junctions, within the possibilities allowed by their constitutive laws, *e.g.* only one effort can be imposed on a p-junction, and only one flow can be computed from it, but since these need no longer correspond to the same bond, the junction may be attacked by one, and respond with another, double-

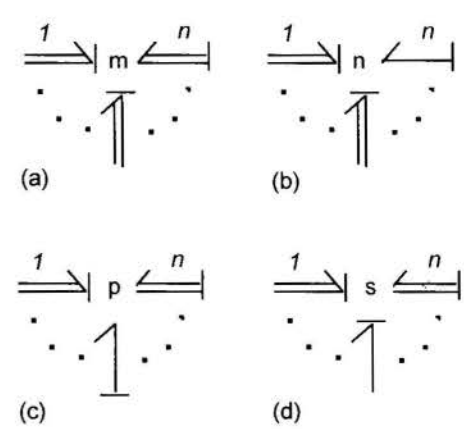


Figure 4. Double causality in thermodynamic junctions.

causality bond. Figures 4c, d show the nonstandard alternatives open to p- and s-junctions.

Control volumes. Karnopp *et al.* (1990) considered the *thermodynamic accumulator*, an adiabatic control volume with variable size and inlet/outlet material streams. Neglecting internal gradients and velocity terms, they wrote energy, mass and "volume" balance equations as

$$\frac{d}{dt}(U) = h_{in}\dot{m}_{in} - h_{out}\dot{m}_{out} - P\frac{d}{dt}(V) \tag{24}$$

$$\frac{d}{dt}(m) = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} \tag{25}$$

$$\frac{d}{dt}(V) = \dot{V} \tag{26}$$

Here too, they perceived the material contained in the control volume as a C-field, but rather than using the fundamental Gibbs formulation for this, they constructed the *pseudo-BondGraph* of Figure 5, with two *pseudo-bonds* T-$\dot{U}$ and P-$\dot{m}$ carrying efforts and flows that are not power covariables (*i.e.* their product is not power flow), and only one true bond, P-$\dot{V}$. The external contributions to the control volume energy, mass and volume are represented as sums of power flows on corresponding p-junctions. Because of the uncomfortable definition of independent thermodynamic variables, the P-$\dot{V}$ bond is made to appear twice in the BG, as if mechanical power of expansion was taken out both at the junction and from the C-field. An activated bond and a modulated flow source therefore become necessary in this model to make clear that $\dot{V}$ is a forcing function externally imposed on the process.

Apart from the use of pseudo-bonds, two features of this BG structure deserve extended comment. The first one is once again the ambiguous use of the dot notation. Clearly, $\dot{m}_{in}$ and $\dot{m}_{out}$ represent mass flow rates, not time derivatives of state variables; on the other hand, since thermodynamics does not contain a general concept of volume conservation or balance, $\dot{V}$ can only stand for the time rate of change of the control volume, thus making Eq. (26) into an identity that just defines the symbol $\dot{V}$. The second observation concerns the p-junctions that are intended to represent Eq. (24) and (25). It is obvious that these cannot be *true* parallel junctions, which would imply equality of efforts on all bonds (*i.e.* equal inlet and outlet temperatures and pressures), but must be inferred to be nonstandard elements, inasmuch as they involve pseudo-bonds. Figure 5 hints at this interpretation by showing the pseudo-bonds as carrying mass or enthalpy flow yet no effort.

The above model remarkably fails to realize that the material within the control volume is itself a thermodynamic system, and should be treated consistently, by using the correct thermodynamic formulation for the internal energy function, *i.e.* the Gibbs fundamental form. The constitutive laws for the C-field will follow from this automatically. What really must specified is the external structure through which the various inputs and outputs are connected to the system ports that carry the thermal, hydraulic and chemical contributions to the internal energy. Consider again the control volume of Figure 5, with the adiabatic assumption dropped for greater generality. Velocity terms are neglected, in order to avoid having to include the momentum or mechanical energy balance in the analysis. This means that the rate of expansion of the control volume, dV/dt cannot be computed from the velocity distribution of the fluid; it is therefore defined as an external forcing function $\vartheta(t)$, *i.e.*

$$P\frac{dV}{dt} = \vartheta(t) \tag{27}$$

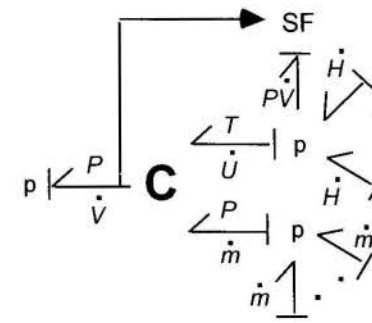


Figure 5. Pseudo BondGraph of the control volume

the dot notation being reserved exclusively for actual flow variables.

The thermal term can in principle be obtained from the entropy balance or second law or thermodynamics for open flow systems,

$$\frac{dS}{dt} - s_{in}\dot{m}_{in} + s_{out}\dot{m}_{out} - \frac{\dot{Q}}{T} = \dot{\sigma}_{irr} \geq 0 \tag{28}$$

but this is inconvenient unless the rate of entropy production due to irreversible processes, $\dot{\sigma}_{irr}$, can be expressed in terms of process and system variables. It proves more expedient to write as before the mass and energy balances for the control volume, Eq. (25) and

$$\frac{dU}{dt} = h_{in}\dot{m}_{in} - h_{out}\dot{m}_{out} + \dot{Q} - P\frac{dV}{dt} \tag{29}$$

and to combine these according to the fundamental equation,

$$T\frac{dS}{dt} = \frac{dU}{dt} + P\frac{dV}{dt} - \mu\frac{dm}{dt}$$

$$= (h_{in} - \mu)\dot{m}_{in} - (h_{out} - \mu)\dot{m}_{out} + \dot{Q} \tag{30}$$

From thermodynamics, $h = \mu + Ts$ and we get the thermal energy balance

$$T\frac{dS}{dt} = \dot{L}_{\mu} + (T\dot{S})_{in} - (T\dot{S})_{out} + \dot{Q} \tag{31}$$

where $\dot{S} = s\dot{m}$ is the convective flow rate of entropy. The chemical energy balance can be similarly written as

$$\mu\frac{dm}{dt} = \mu(\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out}) = \mu_{in}\dot{m}_{in} - \mu_{out}\dot{m}_{out} - \dot{L}_{\mu} \tag{32}$$

with the expression on the right hand side explicitly showing the convective flow rates of chemical potential, and the irreversible dissipation of chemical energy into thermal energy, given by

$$\dot{L}_{\mu} = (\mu_{in} - \mu)\dot{m}_{in} - (\mu_{out} - \mu)\dot{m}_{out} \tag{33}$$

The thermodynamic control volume can now be represented by a true BG structure. We will show here only the slightly simpler case of a perfectly mixed control volume, whose output stream has the same physical properties as the material inside. Eq. (31) and (32) simplify to

$$T\frac{dS}{dt} = (\mu_{in} - \mu_{out})\dot{m}_{in} + (T\dot{S})_{in} - (T\dot{S})_{out} + \dot{L} \qquad (34)$$

$$\mu\frac{dm}{dt} = \mu_{in}\dot{m}_{in} - \mu_{out}\dot{m}_{out} - (\mu_{in} - \mu_{out})\dot{m}_{in} \qquad (35)$$

The BG is shown in Figure 6a. At the core of this is the C-field representing the material contained in the control volume, a generic thermodynamic system as anticipated. The inlet and outlet streams are shown as multibonds, resolved into thermal and chemical components for interaction with the control volume. A s-junction is used to represent the degradation of chemical energy from outside to inside chemical potential levels. This lost chemical work is sent to the thermal energy port through a n-junction, which also receives the convected entropy, plus heat flow from a thermal flow source. The mechanical energy port is directly connected to a flow source SF that imposes the volume history $\vartheta(t)$. All bonds in Figure 6a are *true bonds*, and the C-field is not an "accumulator", but a *true capacitor* with stored energy function.

The causal structure of Figure 6a demands careful analysis. If the preferred integral causality is specified for the C-field, the constitutive laws are used to compute the efforts. Mandatory causalities are therefore imposed on the p-junctions (since the common effort is now known on all bonds), and on the n-junction (since all efforts and flows other than dS/dt must be input as data for this flow to be computed from the single constitutive law). These causalities now propagate to the s-junction, which requires the external flow and effort as data to compute the information required by the p- and n-junctions.

Sharpe (1993) proposed a new BG element, the multiport *control volume*, defined as an explicit *CV-field* having Eq. (31), (32) and presumably (27) as constitutive equations. The BG of Figure 6a can be seen in this respect as an implicit-field elucidation of the internal structure of the CV-field. It justifies the explicit causality shown in Figure 6b, where the heat and mass flows, the rate of volume expansion and the inlet enthalpy must all be made known to the CV-field for it to compute its internal properties.

CONCLUSIONS

A critical review of the BondGraph analysis of thermodynamic systems and processes has been presented. Inconsistencies in the standard representations have been pointed out and traced to faulty application of thermodynamic principles. New elements and structures have been proposed that avoid the pitfalls of traditional treatments and permit true BondGraph modelling of thermofluid devices. This improved methodology is currently being applied to the study of refrigeration technologies, *e.g.* BG models of vapour compression cycles have been generated as a basis for numerical simulation. Space limitations prevent us from presenting a more detailed report of these developments.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partly carried out during a stay by C.O.-F. at the Engineering Design Centre of Lancaster University, UK. Financial support from the British Council, and from Simon Bolivar University through the Dean's Office for Research and Development and the Director's Office for Professorial Development, is gratefully acknowledged. Very special thanks are due to to Prof. John E. E. Sharpe, former Director of the Lancaster Engineering Design Centre, for his support and valuable comments.

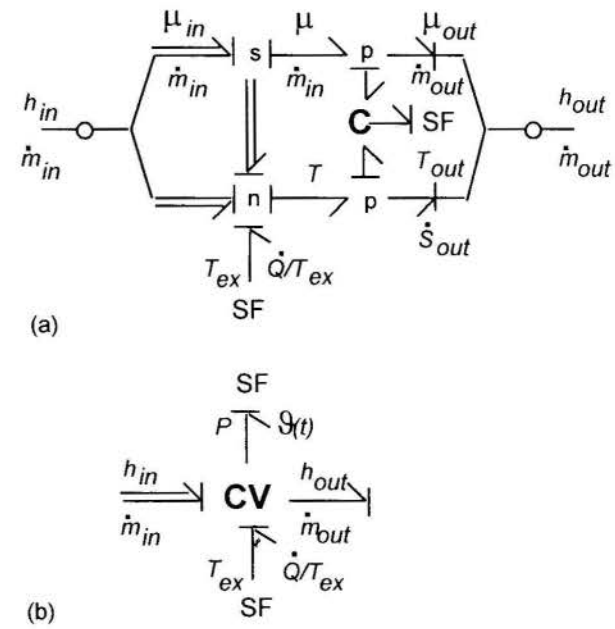


Figure 6. True BondGraphs of well-mixed control volume.

REFERENCES

DeNovellis, M, 1990, "Bond Graph Modelling of Variable Geometry Turbocharged Diesel Engines", PhD Thesis, University of London, London.

Karnopp, D. C., Margolis, D. L. and Rosenberg, R. C., 1990, *System Dyanmics: A Unified Approach*, 2nd Edn., Wiley-Interscience, New York.

LeSeur, P. K., 1980, "Interactive Transient Behaviour of Rankine Cycle Machines", PhD Thesis, London University, London.

Sharpe, J. E. E., 1993, *An Introduction to Bond Graph Analysis and its Application to the Understanding of Causal and Dynamic Behaviour of Heat Engines*, Internal Report 1993/7, Engineering Design Centre, Lancaster University, Lancaster, UK.

Thoma, J., 1990, *Simulation by Bond Graphs. Introduction to a Graphical Method*, Springer-Verlag, Berlin.

SUPPLEMENTARY MATERIAL

Table 2, which has been omitted to comply with the page number limit, is available from the authors as a separate handout.

ANÁLISE DAS DERIVADAS PARCIAIS DA EXERGIA DO VAPOR D'ÁGUA EM RELAÇÃO À PRESSÃO E À TEMPERATURA

Jorge Llagostera
Depto. Energia - Fac. Engenharia Mecânica
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
13083-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

Foi estudada a variação da exergia física do vapor d'água superaquecido, por meio de suas derivadas parciais em relação à pressão e à temperatura, bem como as derivadas da função definida por meio da divisão da exergia pela entalpia, ambas definidas com base no mesmo estado de referência. Essas derivadas foram determinadas e analisadas para temperaturas entre 200°C e 700°C, e pressões entre 2 MPa e 18 MPa. Os resultados obtidos proporcionam um conhecimento mais aprofundado das propriedades do vapor d'água, de utilidade em análises envolvendo a aplicação da Segunda Lei da Termodinâmica.

INTRODUÇÃO

O método da exergia para a análise termodinâmica de sistemas térmicos vem sendo bastante utilizado (Moran & Sciubba, 1994). Diversos grupos de pesquisa tem aplicado essa metodologia ao estudo de variados sistemas e processos térmicos. O interesse despertado pela metodologia baseia-se no reconhecimento crescente da importância da aplicação da Segunda Lei da Termodinâmica para um conhecimento mais aprofundado de sistemas e processos energéticos complexos (Bejan, 1988). Também o desenvolvimento da sensibilidade social e científica em relação à conservação e ao uso racional dos recursos naturais, bem como a relevância das questões ambientais, tem contribuído para essa maior utilização do método (Bejan et al., 1996). O conceito de disponibilidade termodinâmica ou exergia tem ocupado papel de grande importância também na fundamentação de diversas metodologias de análise termoeconômica, o que pode ser constatado por meio dos trabalhos de Frangopoulos (1988), Tsatsaronis et al. (1994) e de Valero et al. (1994).

Este trabalho apresenta e discute resultados de um estudo desenvolvido sobre a variação da exergia física do vapor d'água em função da pressão e da temperatura. As derivadas parciais da exergia física em relação à pressão e à temperatura foram calculadas, com base nas correlações de Keenan & Kays, para numerosos estados termodinâmicos. Foi também analisado o comportamento da relação entre exergia e entalpia, com base num procedimento análogo.

O estudo dessas derivadas é bastante interessante, pois proporciona uma indicação direta do comportamento do vapor quanto à variação relativa de seu conteúdo exergético e sua relação com o conteúdo entálpico ao longo de processos termodinâmicos. Essas derivadas envolvendo exergia e entalpia podem ser consideradas também propriedades termodinâmicas, uma vez fixada a temperatura do estado de referência. Suas variações permitem analisar o desempenho termodinâmico dos diferentes sistemas sob um distinto ponto de vista. A fim de permitir uma visualização da variação dessas grandezas em função da pressão e da temperatura foram elaborados diversos gráficos e foram estudadas as variações dessas relações, obtendo-se uma compreensão mais detalhada sobre o comportamento exergético do vapor d'água superaquecido.

METODOLOGIA

No âmbito deste trabalho a exergia física específica da água, considerada em condições de fluxo, foi calculada de acordo com a expressão (1). O estado de referência adotado para a avaliação da exergia física foi identificado por T_o=298,15K (25°C) e p_o=0,101325 MPa. A entalpia específica da água, para o estado de referência citado corresponde a h_o=104,972 kJ/kg, enquanto a entropia específica da água nesse mesmo estado é dada por s_o= 0,367375 kJ/kgK.

$$e_f = h - h_o - T_o(s - s_o) \tag{1}$$

A exergia física, definida desse modo, tem particular utilidade para o estudo termodinâmico de volumes de controle nos quais ocorre entrada e/ou saída de matéria. O conceito vem sendo aplicado na elaboração de balanços e fluxogramas exergéticos, os quais facilitam a avaliação da capacidade de produção de potência dos diversos fluxos envolvidos em sistemas térmicos. Torna-se também mais fácil a identificação de fatores que provocam maiores irreversibilidades. Em sistemas complexos envolvendo reações químicas é também muito útil o uso da exergia química e da exergia total, o que permite avaliações exergéticas de caráter global (Szargut et al., 1988).

Visando facilitar a distinção e qualificação de estados em que a substância apresenta idênticos valores de exergia é muito interessante utilizar a grandeza adimensional ξ a qual constitui uma relação entre a exergia física específica e a entalpia específica do fluido, apresentada e discutida em trabalho anterior (Llagostera, 1995). Essa relação foi definida de acordo com a expressão (2).

$$\xi = 1 - \frac{T_o(s - s_o)}{h - h_o} \cdot \tag{2}$$

A grandeza ξ pode também ser considerada uma propriedade termodinâmica, uma vez fixado o estado de referência. Por meio dessa relação é possível comparar, do ponto de vista da Segunda Lei da Termodinâmica, estados que apresentam a mesma exergia física. Comparando dois estados de idêntica exergia física, aquele que apresentar maior valor de ξ apresenta maior incorporação de exergia por unidade de entalpia correspondente. Em avaliações termoeconômicas essa relação pode ter também bastante utilidade no estabelecimento de custos exergéticos.

A diferencial exata da exergia, formulada em termos de pressão e temperatura, poder ser obtida da expressão (3).

$$de_f = \left(\frac{\partial e_f}{\partial p}\right)_T dp + \left(\frac{\partial e_f}{\partial T}\right)_p dT \tag{3}$$

As derivadas parciais da exergia em relação à pressão e em relação à temperatura podem ser expressas por meio das relações (4) e (5).

$$\mathrm{d(e,T)} = \left(\frac{\partial e_f}{\partial T}\right)_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p - T_o\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p \tag{4}$$

$$\mathrm{d(e,p)} = \left(\frac{\partial e_f}{\partial p}\right)_T = \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T - T_o\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T \tag{5}$$

Para a grandeza ξ ("csi") as derivadas parciais (6) e (7) podem ser determinadas por meio da diferenciação da expressão (2).

$$\left(\frac{\partial \xi}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{(h - h_o)}\left[(1-\xi)\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p - T_o\left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p\right] \tag{6}$$

$$\left(\frac{\partial \xi}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{(h - h_o)}\left[(1-\xi)\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T - T_o\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T\right] \tag{7}$$

Pode-se modificar essas relações substituindo a expressão (4) em (6) e a expressão (5) em (7), obtendo-se as expressões (8) e (9), respectivamente.

$$\mathrm{d(csi,T)} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial T}\right)_p = \frac{1}{(h - h_o)}\left[\left(\frac{\partial e_f}{\partial T}\right)_p - \xi\left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p\right] \tag{8}$$

$$\mathrm{d(csi,p)} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{(h - h_o)}\left[\left(\frac{\partial e_f}{\partial p}\right)_T - \xi\left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_T\right] \tag{9}$$

No âmbito deste trabalho, os valores de entalpia, de exergia, da relação ξ e das diversas derivadas parciais foram calculados para uma grande quantidade de estados termodinâmicos do vapor d'água superaquecido. Para a determinação dessas propriedades foram utilizadas subrotinas computacionais (Llagostera, 1994) desenvolvidas com base em correlações estabelecidas por Keenan et al. (1978) para a energia livre de Helmholtz e outras relações termodinâmicas.

RESULTADOS

Para a análise da variação das derivadas parciais foram determinadas as propriedades termodinâmicas de estados definidos pela pressão e temperatura. A temperatura foi considerada no intervalo entre 200 e 700°C, envolvendo 101 níveis de temperatura. Foram considerados cinco níveis de pressão, entre 2 e 18 MPa .

A fim de facilitar a visualização dos aspectos discutidos nos próximos ítens sobre a variação das derivadas parciais da exergia em relação à temperatura e à pressão é apresentado o gráfico de variação da exergia do vapor superaquecido em função da temperatura para os níveis de pressão considerados neste trabalho, de acordo com a Figura 1. Para temperaturas próximas a 450°C verifica-se uma alteração na ordem das curvas correspondentes às pressões mais elevadas. Acima dessa temperatura as curvas indicam exergia crescente com o aumento da pressão, enquanto que abaixo dessa temperatura a exergia apresenta-se decrescente com o incremento da pressão. Para pressões inferiores o comportamento da exergia é mais simples, apresentando crescimento em função da pressão na faixa entre 2 MPa e 6 MPa. Para todos os níveis de pressão a exergia apresenta crescimento em função da temperatura, apresentando, não obstante, taxas distintas de crescimento nas diferentes regiões de temperatura e pressão.

Na Figura 2 é apresentado o gráfico da variação de ξ para o vapor d'água superaquecido em função da temperatura. O valor de ξ permite distinguir, com base na Segunda Lei da

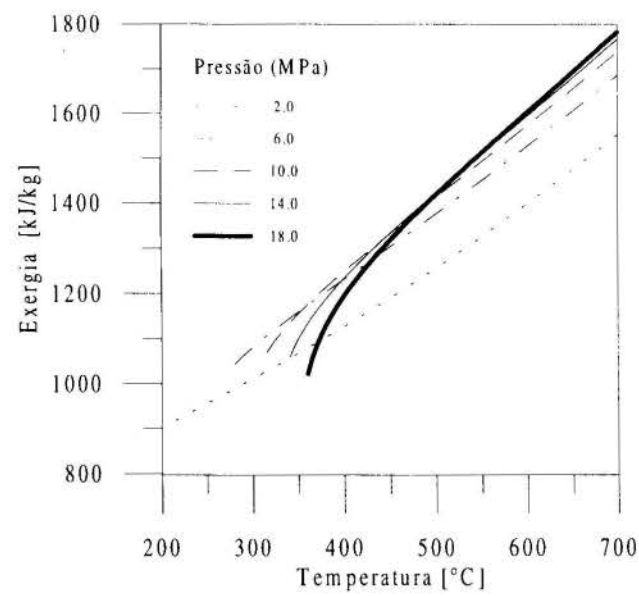


Figura 1 - Exergia do vapor superaquecido.

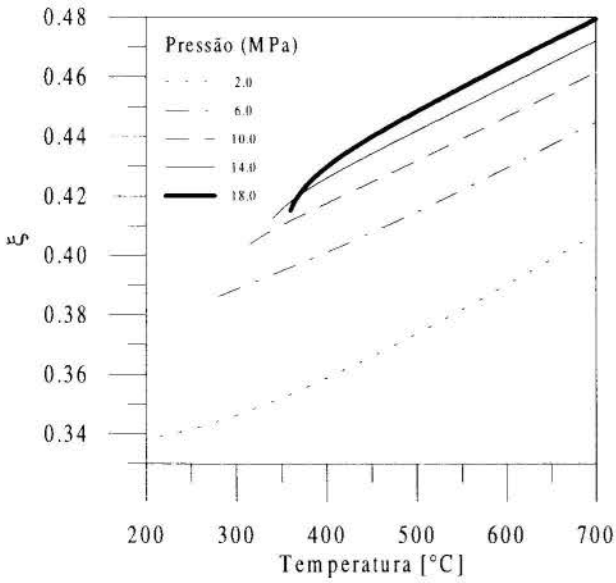


Figura 2 - Grandeza ξ para vapor superaquecido.

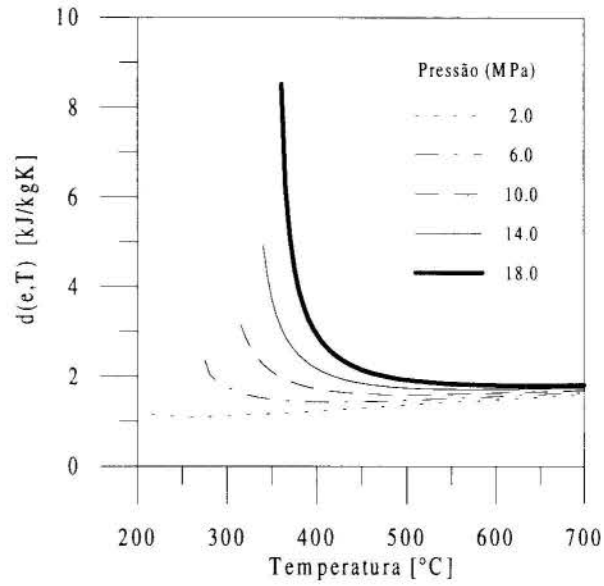


Figura 3 - Derivada parcial da exergia em relação à temperatura (pressão constante).

Termodinâmica, estados que apresentam a mesma exergia física específica. Um valor superior de ξ indica uma incorporação maior de exergia por unidade de entalpia, possibilitando um maior potencial de produção de trabalho. Nesse gráfico observa-se que com o aumento da pressão o incremento de ξ em função da pressão tende a ser menos importante. Pode-se também observar no gráfico da Figura 2 que, a partir de aproximadamente 450°C a derivada de ξ em relação à temperatura, para pressão constante, varia pouco com o nível de pressão, já que nessa região todas as curvas apresentam inclinações muito similares. Com temperatura constante observa-se que os maiores ganhos de ξ com o aumento de pressão ocorrem na região abaixo de 10 MPa, confirmando as observações efetuadas anteriormente. A relação termodinâmica ξ apresenta, de modo geral, um comportamento mais simples do que a exergia.

Derivadas parciais em relação à temperatura. Os valores obtidos para a derivada parcial da exergia em relação à temperatura são representados na Figura 3.

Todos os valores obtidos são positivos, indicando o aumento da exergia com a elevação da temperatura, mantida a pressão constante.

Para as pressões de 14 e 18 MPa observam-se valores bastante elevados para essa derivada na região próxima à saturação, e sua queda, à medida em que a temperatura aumenta. Para 14 MPa é atingido um mínimo próximo a 570°C, e para 18 MPa o mínimo é atingido nas proximidades de 635°C. A partir do ponto de mínimo o crescimento é muito pequeno.

No caso das pressões de 6 e 10 MPa é possível observar também uma queda na região próxima à saturação. Nessa região os valores são, no entanto, bastante inferiores aos referidos anteriormente. É possível observar também nestes casos pontos de mínimo, que ocorrem ao redor de 415°C para a pressão de 6MPa , e de 500°C para 10 MPa . A partir dos pontos de mínimo a variação é também nestes casos pouco significativa.

Para a pressão de 2 MPa , na região próxima à saturação, o valor da derivada não é elevado e o ponto de mínimo ocorre ao redor de 260°C A partir do ponto de mínimo constata-se um crescimento observável.

Na região de alta temperatura observa-se a aproximação das cinco curvas com o aumento da temperatura, indicando a redução do efeito da pressão sobre o valor da derivada da exergia nessa região.

Na Figura 4 é apresentada a variação da derivada parcial da entalpia em relação à temperatura (pressão constante), definida

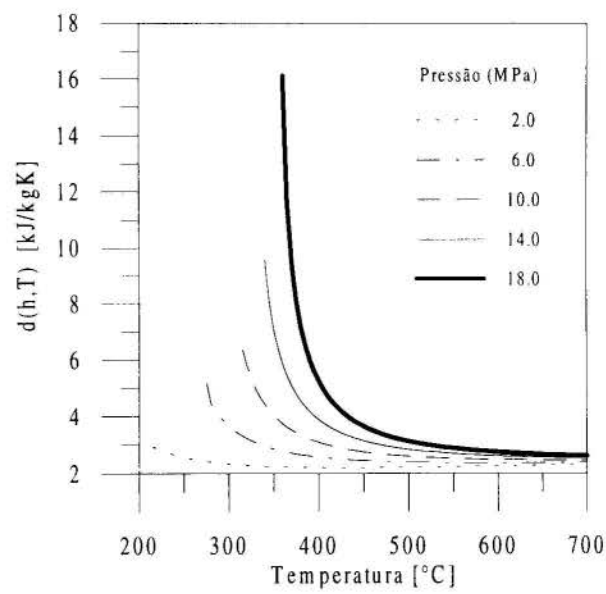


Figura 4 - Derivada parcial da entalpia em relação à temperatura (pressão constante).

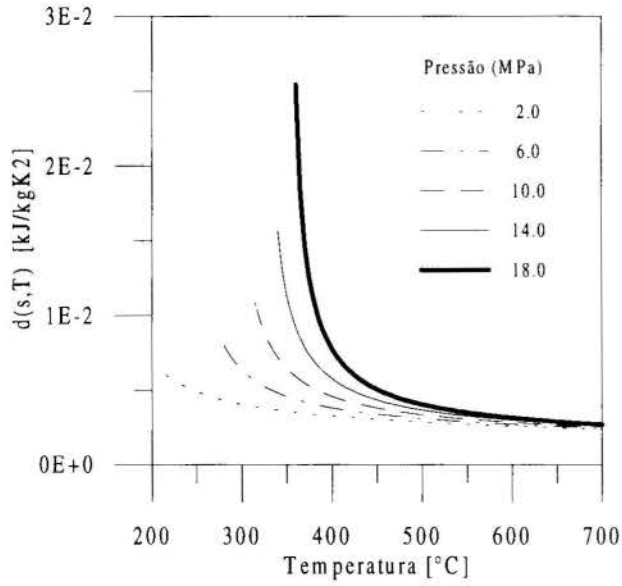


Figura 5 - Derivada parcial da entropia em relação à temperatura (pressão constante).

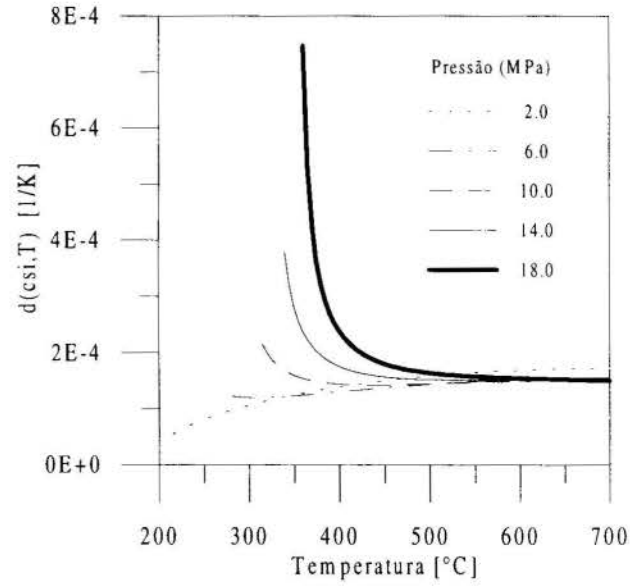


Figura 6 - Derivada parcial da grandeza ξ em relação à temperatura (pressão constante).

também como calor específico à pressão constante. O aspecto geral desse gráfico é bastante similar ao da derivada da exergia. No entanto, na região de alta temperatura observa-se, para as altas pressões, uma suave tendência decrescente dos valores da derivada da entalpia em relação à temperatura.

Os valores da derivada parcial da entropia em relação à temperatura são apresentados na Figura 5. O aspecto das curvas é bastante semelhante ao observado para as derivadas da entalpia, com pequenas diferenças na região de temperaturas mais próximas à saturação e para as pressões mais baixas. Os módulos são da ordem de centésimos, e os valores obtidos são todos positivos, indicando o crescimento da entropia com a temperatura.

A fim de explorar com mais detalhe o comportamento da exergia, foi também estudado a variação da grandeza ξ, em termos de suas derivadas parciais. Na Figura 6 é apresentada a variação da derivada parcial dessa grandeza em relação à temperatura para pressão constante. Deve-se observar que o módulo dessas derivadas é bastante pequeno, pois a grandeza ξ apresenta valores sempre inferiores à unidade, indicando a quantidade de exergia por unidade de entalpia. Todos os valores obtidos são positivos, indicando o crescimento da grandeza com a temperatura.

As curvas correspondentes aos três níveis superiores de pressão apresentam um comportamento similar, com valores elevados decrescentes na região mais próxima à saturação. Na região de alta temperatura observa-se uma estabilização e aproximação das curvas.

Para a pressão de 2 MPa observa-se um comportamento diferente, que pode ser melhor apreciado na Figura 7, onde é apresentada com mais detalhe a região inferior da Figura 6. Para essa pressão a derivada cresce na região mais próxima à saturação, diminuindo a taxa de crescimento à medida que a temperatura aumenta. Na região de alta temperatura seus valores são superiores aos correspondentes a pressões mais elevadas.

Quanto à pressão de 6MPa , observa-se um comportamento de transição, intermediário entre as pressões superiores e a inferior.

Derivadas parciais em relação à pressão. A variação da derivada parcial da exergia em relação à pressão, mantida a temperatura constante, é apresentada na Figura 8. É possível observar que essa derivada cresce com a temperatura, para os diversos níveis de pressão considerados. Esse crescimento verifica-se de modo mais intenso na região próxima à saturação, e de modo muito mais suave na região de altas temperaturas.

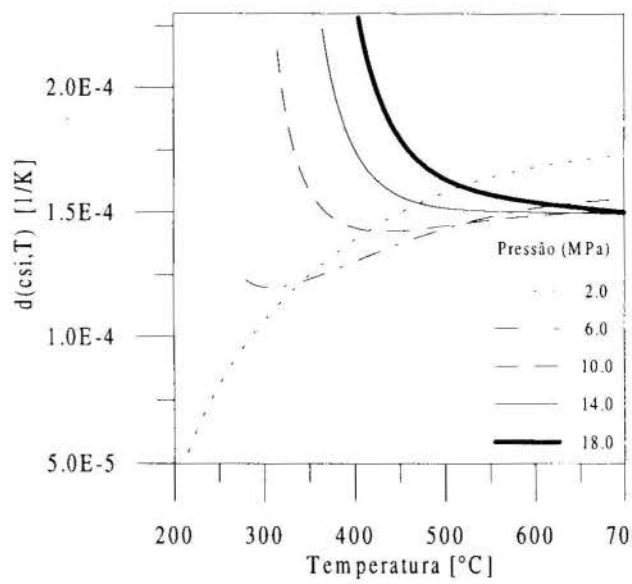


Figura 7 - Detalhe da derivada parcial da função ξ em relação à temperatura (pressão constante).

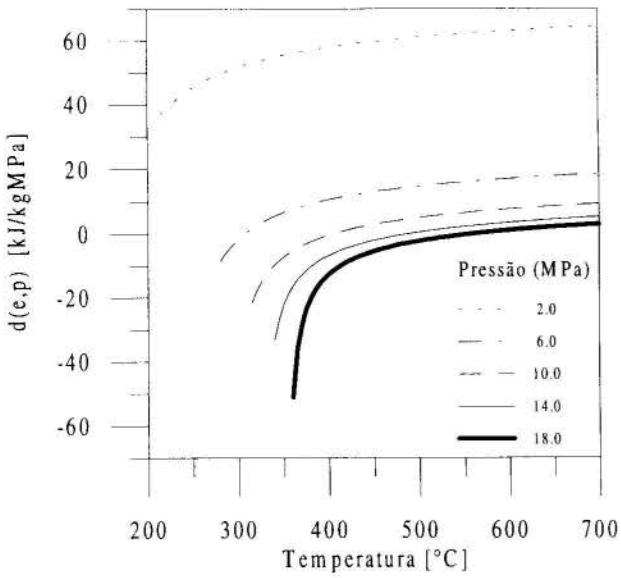


Figura 8 - Derivada parcial da exergia em relação à pressão (temperatura constante).

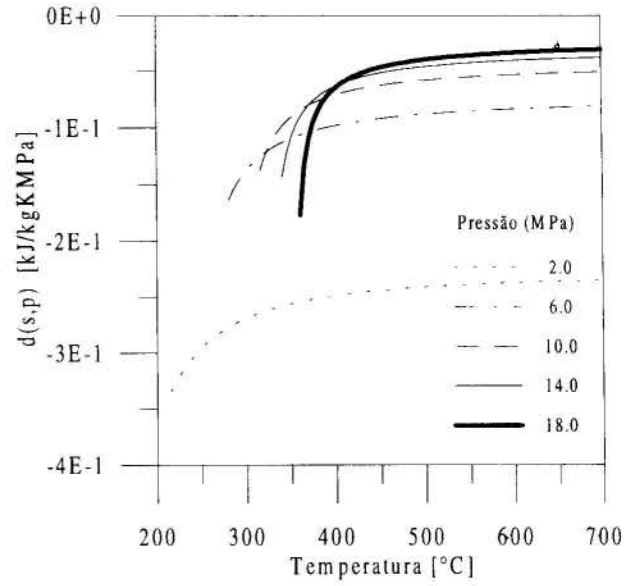


Figura 10 - Derivada parcial da entropia em relação à pressão (temperatura constante).

O maior valor dessa derivada é obtido para o nível mais baixo de pressão, 2 MPa, único nível em que essa derivada manteve-se sempre positiva. Para a pressão de 6MPa observaram-se valores positivos a partir de 310°C, para 10MPa foram verificados valores positivos a partir de 405°C. Nos níveis mais elevados de pressão, 14 e 18 MPa, o valor da derivada da exergia apresentou valores positivos a partir de 490°C e de 560°C respectivamente. Nos intervalos em que a derivada da exergia em relação à pressão é negativa o aumento da pressão, mantendo a temperatura constante, conduz a uma redução da exergia física do vapor superaquecido.

É também possível observar que à medida em que a pressão cresce as curvas se aproximam, demonstrando uma diminuição da influência da variação da pressão sobre a derivada da exergia em relação à pressão. Pode-se concluir que na região de pressões inferiores a 6 MPa podem ser obtidos grandes incrementos de exergia com o aumento da pressão, em todas as temperaturas consideradas.

A variação da derivada parcial da entalpia em relação à pressão é apresentada na Figura 9. Para todos os níveis de pressão considerados os valores obtidos são negativos, indicando a queda da entalpia com o aumento da pressão, mantida a temperatura constante. Os valores diminuem com o aumento da pressão. O módulo das derivadas é maior na região próxima à saturação, diminuindo à medida que a temperatura aumenta.

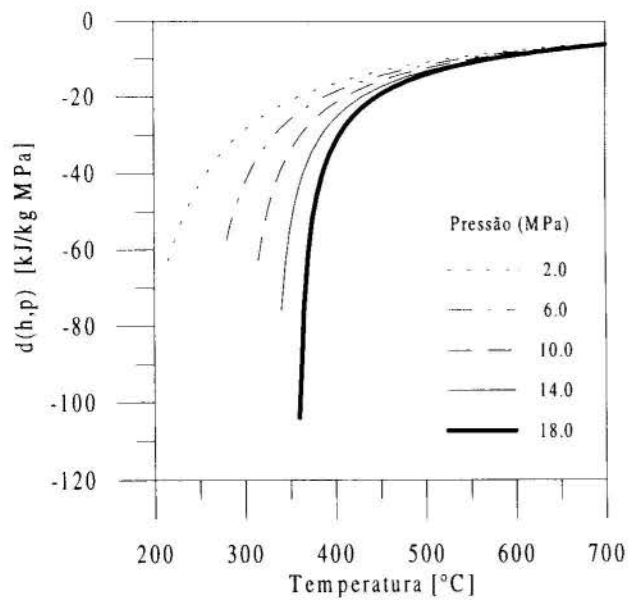


Figura 9 - Derivada parcial da entalpia em relação à pressão (temperatura constante).

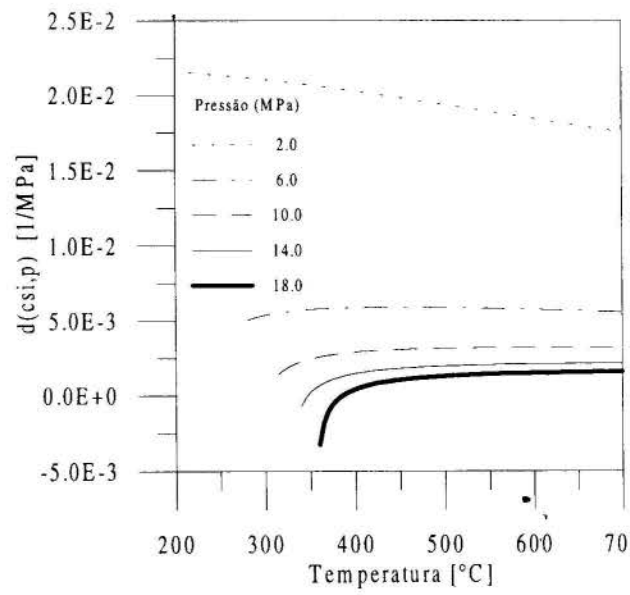


Figura 11 - Derivada parcial da grandeza ξ em relação à pressão (temperatura constante).

As cinco curvas aproximam-se à medida que a temperatura aumenta, e acima de 650°C as mesmas coincidem. Isso indica que a influência da pressão sobre essas derivadas diminui muito para temperaturas elevadas.

Quanto à derivada parcial da entropia em relação à pressão, os valores correspondentes são apresentados na Figura 10. Também neste caso todos os valores são negativos, indicando a queda da entropia com o aumento da pressão. Essa tendência de queda da entropia com a pressão é mais acentuada para a região de baixa pressão, diminuindo à medida que a pressão aumenta. Na região mais próxima à saturação as derivadas da entropia assumem valores de maior módulo. É interessante também ressaltar o cruzamento das curvas correspondentes aos níveis mais elevados de pressão, indicando inversão relativa de tendências.

A fim de estudar a variação da exergia por unidade de entalpia em função da pressão, foi calculada a derivada da grandeza ξ em relação à pressão, mantendo a temperatura constante. Os valores obtidos para essas derivadas são apresentados na Figura 11. Para a pressão de 2 MPa os valores obtidos são os mais elevados, e apresentam um comportamento decrescente com o aumento da temperatura. Para os demais níveis de pressão os valores obtidos são bastante inferiores, caindo com o aumento da pressão. No intervalo de temperatura estudado a curva correspondente à pressão de 6 MPa apresenta um máximo próximo a 445°C, enquanto a curva associada ao nível de pressão 10 MPa apresenta um máximo nas proximidades de 590°C. Para as pressões mais elevadas não foi verificado nenhum ponto de máximo no intervalo estudado, e dessa forma, para essas pressões a derivada parcial é sempre crescente.

CONCLUSÃO

O estudo das derivadas parciais da exergia e da grandeza termodinâmica ξ (relação entre exergia e entalpia específicas, determinadas com base no mesmo estado de referência) do vapor d'água superaquecido permite visualizar e compreender com maior clareza o comportamento das propriedades termodinâmicas da água do ponto de vista da Segunda Lei da Termodinâmica. A fim de aprofundar a análise foram apresentadas também as derivadas parciais da entalpia e da entropia. Foram também apresentados os valores da exergia e da grandeza ξ para os mesmos intervalos de temperatura e pressão. Os resultados obtidos e sua discussão auxiliam a compreensão do comportamento termodinâmico do vapor superaquecido em termos do potencial de produção de trabalho. Para a realização de análises termodinâmicas e exergéticas, e também para o projeto e operação de sistemas térmicos que utilizam vapor superaquecido, o conhecimento aprofundado das propriedades estudadas no presente trabalho é de grande utilidade.

REFERÊNCIAS

Bejan, A., 1988, "Advanced engineering thermodynamics", John Wiley, New York.

Bejan, A., Tsatsaronis, G., and Moran, M.J., 1996, "Thermal Design and Optimization", John Wiley, New York.

Frangopoulos, C.A., 1988, "Optimal Design of a Gas Turbine Plant by a Thermoeconomic Approach", *Proceedings, ASME COGEN TURBO POWER' 88*, G.K. Sevory and T.H. Franson, eds., ASME, IGTI - Vol. 3, pp. 369-375.

Keenan, J.H., Keyes, F.G., Hill, P.G., and Moore, J.G., 1978, "Steam tables: thermodynamic properties of water, including vapor, liquid, and solid phases (SI units)", John Wiley, New York.

Llagostera, J., 1994, "Subrotinas computacionais de elevada exatidão para determinação de propriedades termodinâmicas da água", *Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, pp. 395-398, ABCM, EPUSP, São Paulo.

Llagostera, J., 1995, "Estudo da relação entre entalpia e exergia da água, aplicável à análise energética e exergética de ciclos termodinâmicos a vapor", *Anais do XIII Congresso Brasileiro e II Congresso Ibero Americano de Engenharia Mecânica*, (CD-ROM, Área: Termociências, Tema: Termodinâmica), 4pp., ABCM, UFMG, Belo Horizonte.

Moran, M.J. and Sciubba, E., 1994, "Exergy Analysis: Principles and Practice", *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 116, pp. 285-290.

Szargut, J., Morris, D.R., and Steward, F.R., 1988, "Exergy Analysis of Thermal, Chemical and Metallurgical Processes", Hemisphere, New York.

Tsatsaronis, G., Lin, L., Tawfic, T., and Gallaspy, D.T., 1994, "Exergoeconomic Evaluation of a KRW-Based IGCC Power Plant", *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 116, pp. 300-306.

Valero, A., Lozano, M.A., Serra, L., and Torres, C., 1994, "Application of the exergetic cost theory to the CGAM problem", *Energy (Oxford)*, Vol. 19, N. 3, pp. 365-381.

ABSTRACT

This paper studies the variation of partial derivatives (temperature and presssure) of the specific thermo-mechanical exergy for superheated steam. The variation of partial derivatives of the themodynamic relation between the exergy and enthalpy (adopting as reference a selected thermodynamic state) was also studied. These relations were determined and analyzed for superheated steam in a range of temperatures (200°C - 700°C) and pressures (2 MPa - 18MPa). The behavior of the partial derivatives is compared and discussed against the variation of enthalpy and entropy, considering the effects of temperature and pressure variations. The analysis performed in this work can help to improve methodologies in Second Law Analysis of thermal systems. The studied relations may be used to compare and evaluate thermodynamic states that have similar exergy content. The aspects focused can be useful in thermodynamic analysis and optimization of steam cycles and thermal processes.

ABCM

METODOLOGIA ENERGÉTICA COMO FERRAMENTA NO GERENCIAMENTO DE QUALIDADE E PRODUTIVIDADE EM CULTIVOS AGRÍCOLAS

Msc. **Rolando Nonato de Oliveira Lima,**
Msc. **José Antônio da Silva**
Ac. **Marcelo Romano Maiello**
Departamento de Ciências Térmicas e dos Fluidos
FUNREI-Fundação de Ensino Superior de São João Del Rei
36300-000 - São João Del Rei - MG - Brasil

RESUMO

Desenvolveu-se, no presente trabalho, uma metodologia de modelamento energético para cultivos agrícolas. Ela consiste na transformação generalizada de entradas e saídas em equivalentes energéticos que posteriormente, podem ser transformadas em equivalentes econômicos. A metodologia foi aplicada em dois cenários agrícolas típicos, mostrando como pode ser útil no gerenciamento de tais cultivos. Constitui portanto, ferramenta auxiliar poderosa no controle da qualidade e produtividade de cultivos agrícolas, uma vez que feito o mapeamento energético, nos permite efetuar a verificação e avaliação de técnicas de cultivo, uso de defensivos e adubos, sistemas de irrigação, trazendo a ação da engenharia para o campo e, permitindo otimizar, modificar e experimentar novas técnicas, adubos, defensivos e arranjos de sistemas de irrigação.

INTRODUÇÃO

Em toda atividade produtiva executada pelo homem, há certo dispêndio energético, como também, agregam-se parcelas de energia ao produto final dessa atividade. A análise energética se preocupa em descrever os componentes do fluxo de energia, associados a uma determinada cultura, permitindo um planejamento em bases efetivas, bem como, a avaliação de necessidades futuras, a correção eventual de práticas agrícolas, e um aumento da eficiência no sistema como um todo, interferindo assim na produtividade e qualidade dessas culturas. Esse trabalho fará uma abordagem de análise energética como ferramenta no gerenciamento da qualidade e produtividade de cultivos agrícolas. Tomando como base para cálculos o cultivo da batata.

RAZÃO DO ESTUDO E IMPORTÂNCIA DA CULTURA

O estado de Minas Gerais é um dos maiores produtores brasileiros de batata com uma área ocupada de cerca de 30.000 ha/ano.

Mais de 80% dessa área é cultivada no Sul de Minas, o restante, sendo distribuído pelas Zonas da Mata, Metalúrgica e Campos Vertentes (EMATER / EMBRAPA, 1977). Para se ter uma idéia clara da importância da cultura seguem-se dados do Anuário Estatístico do IBGE. Esses dados compreendem os anos 80/84 e foram resumidos em tabelas considerando tanto o Brasil como os principais estados produtores (IBGE/1985). O modelo foi aplicado para essa época em função da maior disponibilidade dos dados nesse período, acreditando-se que tais quadros não tenham sofrido grandes alterações. No entanto, acrescenta-se que essa metodologia pode ser aplicada a qualquer época, possibilitando o mapeamento energético de uma cultura para subsequente análise.

O quadro 1 a seguir fornece dados relativos a batata no Brasil com sua produtividade e área cultivada e, o quadro 2, dados comparativos entre os estados de maior produção no país e suas respectivas posições no cenário nacional na produção da batata.

Quadro 1 - Características da Cultura da Batata no Brasil

Ano	Produção (Ton.)	Área Cultivada (ha.)	Produtividade Ton./ha.
1980	1.939.537	181.084	10,71
1981	1.912.619	170.982	11,18
1982	2.154.775	182.504	11,80
1983	1.818.004	167.878	10,82
1984	2.172.055	172.465	12,59

O quadro 1 nos mostra que no período entre 1980 a 1984, a produção anual aumentou enquanto a área cultivada diminuiu, consequentemente observa-se um leve aumento na produtividade.

Quadro 2 - Dados Comparativos da Cultura da Batata em Estados Brasileiros

Ano	1981			
Estado	Produção ton	Posição	ÁreaCultiv. ha.	Produtivid. Ton/ha
São Paulo	495.600	1	29.440	16,83
Minas Gerais	492.729	2	33.470	14,72
Parana	459.375	3	39.146	11,73
Brasil	1.912.169	--	170.982	11,18
Ano	1982			
Parana	598.533	1	50.460	11,86
São Paulo	573.315	2	31.944	17,94
Minas Gerais	546.818	3	32.248	16,95
Brasil	2.154.775	--	182.504	11,81
Ano	1983			
São Paulo	528.900	1	31.060	17,02
Minas Gerais	462.072	2	27.487	16,81
Paraná	422.870	3	45.004	9,39
Brasil	1.818.004	--	167.878	10,82
Ano	1984			
Minas Gerais	596.360	1	33.128	18,00
São Paulo	545.229	2	29.454	18,51
Paraná	509.673	3	40.929	12,45
Brasil	2.172.055	--	172.465	12,59

O quadro 2 nos mostra os principais produtores nacionais de batata durante o período entre 1981 a 1984, e suas respectivas posições no cenário nacional. Ocupando MG uma posição de destaque nesse período.

MATERIAL E MÉTODOS

No estudo particular desse trabalho, a análise energética foi aplicada a dois cenários típicos do Sul de Minas, especificamente em Itajubá: a plantação de batata usando recursos técnicos de irrigação e, a mesma cultura usando tão somente a disponibilidade hídrica das chuvas. O processo de análise energética não leva em conta a energia embutida no trabalho humano propriamente dito por diversas razões:

- deveria ser avaliada a alimentação de cada trabalhador bem como as variações alimentares de cada contexto;
- deveriam ser considerados os acessórios utilizados por cada trabalhador em suas tarefas inclusive as preferências particulares de cada um;
- ter-se-ia de avaliar o total de energia despendida pelo grupo social como elemento de suporte do trabalhador, incluída principalmente sua família.

Além disso não se incluem no estudo vários índices adotados em análises similares feitas nos Estados Unidos por outras razões:

- não se considerou o conteúdo energético do maquinário disponível na bibliografia dada por Pimentel (1980) devido aos riscos de imprecisão acentuada, conforme as ressalvas feitas pelo próprio autor;
- certos combustíveis fósseis foram deixados de lado (gasolina , GLP, gás natural, etc.) por não serem usados nos cenários estudados aqui;
- não se considerou a energia envolvida no transporte dos produtos até os centros consumidores pelo fato de haver larga variabilidade de destinos, e, porque os índices disponíveis são típicos de países mais desenvolvidos com malha viária de distribuição adequadas e definidas.

DESCRIÇÃO DOS CENÁRIOS

Conforme a realidade agrícola da região determinaram-se os cenários descritos abaixo:

- Cenário 1:

- plantio de batata com uso de irrigação e mecanização agrícola;
- época do ano: "inverno";
- período: abril/junho;
- região: Itajubá e circunvizinhanças.

- Cenário 2:

- plantio de batata sem o uso de irrigação, aproveitamento da disponibilidade das chuvas e uso de tração animal;
- época do ano: "águas";
- período: setembro/novembro;
- região: Itajubá e adjacências.

DETERMINAÇÃO DA DEMANDA DE INSUMOS

Para levantamento dos dados relativos a cada cenário contou-se com a colaboração do escritório local da EMATER. Feitos esses levantamentos recorreu-se ao comércio local, para se levantar as composições típicas dos inseticidas utilizados. Assim, um conjunto significativo de informações foi obtido e pode-se passar à tabulação dos conteúdos energéticos de cada cenário. Estes dados foram resumidos nos quadros A1 e A2 de insumos que são apresentados a seguir:

Quadro A1 - Quadro de insumos, **cenário 1**

A.1	**Quadro de Insumos**	Área de Referência: 1 ha.
-		
	CENÁRIO: 1	Características: **com irrigação**
Cultura: BATATA		Produção Bruta: 24.000 kg. Unidade: 400 sacos de 60 kg.

1 - Consumo Combustível			**2 - Demanda de Mão de Obra**		
Trator:			- Operação I:		
- Operação:			☒ M. O. Motorizada	6	h.
Aração	3	h.	☒ Cultivo	80	h.
Gradagem	2	h.	☒ Plantio	240	h.
Sulcação	1	h.	☒ Trat. Pulv.	160	h
TOTAL:	6	h.	☒ Colheitas	480	h.
- Cons. Horário:	2	l.	- Operação II:		
- Cons.TOTAL:	12	l.	☐ Abertura de sulco		
			☐ Adubação		
			☐ Semeio		
3- Demanda de Tração Animal			☐ Fech. de sulco		
- Operação:			☐ Tratos cultiv.		
Aração	--		☐ Colheita		
Gradagem	--		**TOTAL:**	966	h.
Limpeza	--				
TOTAL:	--	h.			
			5 - Equipamento de Irrigação		
4 - Sementes			Vol.Total (V_t):	7360	m^3
- Quant. de Caixas:	80	und.	Rend. da Bomba (η_b):	0,58	
- Peso Unitário:	30	kg.	Alt. Man. (H_{man}):	65,0	m.
- Peso TOTAL:	2400	kg.	*Cons. de Óleo :	711,8	l.

6 - Adubos

Item	Quantidade/Hectare	Composição
Adubos (N : P : K)	3000 kg.	4 : 16 : 8
Calcário	2000 kg.	
Cobertura	500 kg.	20% N

7 - Defensivos

Nome	Quantidade Aplicada	Composição Química	Total
Dithame M45	20,0 kg.	800 g./kg.	16,0 kg.
Brestam	5,0 kg.	200 g./kg.	1,0 kg.
Ridomil	2,5 kg.	480 g./kg.	1,2 kg.
Difolatam 4F	5,0 litros	500 g./kg.	2,5 kg.
Tamaron	3,0 litros	600 g./kg.	1,8 kg.
Thiobel	5,0 kg.	50 %	2,5 kg.
		Total Geral:	25,00 kg.

O cálculo feito para o consumo de óleo para irrigação é dado pela equação seguinte:

$$* \text{ Consumo de Óleo para Irrigação} = 0.233 \times V_t \times H_{man} / 270 \times \eta_b \quad (1)$$

Quadro A2 - Quadro de insumos - **cenário 2**

A.2 Quadro de Insumos	Área de Referência: 1 ha.
CENÁRIO: 2	Características: **sem irrigação**
Cultura: BATATA	Produção Bruta: 15000 kg. Unidade: 250 sacos de 60 kg.

1 - Consumo Combustível

Trator:
- Operação:
  - Aração --
  - Gradagem --
  - Sulcação --
  - TOTAL: -- h.
- Cons. Horário: -- l.
- Cons. TOTAL: -- l.

2 - Demanda de Mão de Obra

- Operação I:
  - ☐ M. O. Motorizada
  - ☐ Cultivo
  - ☐ Plantio
  - ☐ Trat. Pulv.
  - ☐ Colheitas
- Operação II:
  - ☒ Abertura de sulco 70 h.
  - ☒ Adubação 70 h.
  - ☒ Semeio 70 h.
  - ☒ Fech. de sulco 70 h.
  - ☒ Tratos cultiv. 360 h.
  - ☒ Colheita 360 h.
  - **TOTAL:** 1000 h.

3-Demanda de Tração Animal

- Operação:
  - Aração 16 h.
  - Gradagem 8 h.
  - Limpeza 240 h.
  - TOTAL: 264 h.

4 - Sementes

- Quant. de Caixas: 80 und.
- Peso Unitário: 30 kg.
- Peso TOTAL: 2400 kg.

5 - Equipamento de Irrigação

Vol.Total (V_t): --

Rend. da Bomba (η_b): --

Alt. Man. (H_{man}): --

*Cons. de Óleo: --

6 - Adubos

Item	Quantidade/ ha	Composição
Adubos (N : P : K)	3000 kg.	4 : 16 : 9
Calcário	2000 kg.	
Cobertura	500 kg.	20% N

7 - Defensivos

Nome	Quantidade Aplicada	Composição Química	Total
Dithame M45	20,0 kg.	800 g./kg.	16,0 kg.
Brestam	5,0 kg.	200 g./kg.	1,0 kg.
Ridomil	2,5 kg.	480 g./kg.	1,2 kg.
Difolatam 4F	5,0 lltros	500 g./kg.	2,5 kg.
Tamaron	3,0 litros	600 g./kg.	1,8 kg.
Thiobel	-----	------	-----
		Total Geral:	22,50 kg.

ÍNDICES TÉCNICOS UTILIZADOS

Para a concepção da análise energética foram adotados os seguintes índices técnicos:

Quadro 3 - Índices técnicos

Nitrogênio	50.241,6 kJ/kg
ADUBOS: Fósforo	12.560,4 kJ/kg
Potássio	6.698,9 kJ/kg
COMBUSTÍVEL: óleo diesel	147.788,1 kJ/kg
CALCÁRIO	1.320,7 kJ/kg
INSETICIDAS	363.874,8 kJ/kg
BATATA PRODUZIDA	3.851,9 kJ/kg (conteúdo energético)

São valores médios normalmente utilizados segundo Pimentel (1980), sendo que o indicador do conteúdo energético da batata descrito é típico de São Paulo e dado por Grawer & Godoy (1967), que difere razoavelmente do valor dado por Pimentel (1980). Essa desvio deve ser levado em conta para estudos comparativos.

ANÁLISE ENERGÉTICA

Uma vez tabelados os insumos requeridos em cada cenário, é feita sua transformação em valores energéticos ou equivalentes energéticos através dos índices técnicos mostrados no quadro 3. Com isso pode-se avaliar o gasto energético em cada caso, verificar quais os fatores que mais afetam este consumo, cotejar cenários entre si e traçar, se necessário, linhas de ação visando modificar esses quadros de tal forma que se verifique uma melhoria na qualidade e produtividade do sistema como um todo. A seguir apresentam-se os quadros 4 e 5 referentes ao cenário 1 e 2 respectivamente, afim de se demonstrar o perfil de cada um deles.

Quadro 4 - Entradas e saídas energéticas por 1 ha. de cultivo. Cenário 1 (com irrigação)

ENTRADAS ENERGÉTICAS			
ITEM	**QUANT./ha.**	**kJ/ha.**	**%**
Mão de Obra	966 h.	--	--
Trator (comb.)	6 h. (12 l.)	$5,73 \times 10^5$	0,79
Adubos	3000 kg.	$1,36 \times 10^7$	18,93
N(4)	120 kg.	$6,03 \times 10^6$	8,35
P(16)	480 kg.	$6,03 \times 10^6$	8,35
K(8)	240 kg.	$1,60 \times 10^6$	2,23
Irrigação (comb.)	711,8 l.	$3,40 \times 10^7$	47,08
Calcário: Ca-Mg	2000 kg.	$2,64 \times 10^6$	3,66
Cobertura	500 kg.	--	--
20% N	100 kg.	$5,02 \times 10^6$	6,96
Inseticida	25 kg.	$9,08 \times 10^6$	12,58
Sementes	2400 kg.	$7,24 \times 10^6$	10,00
	TOTAL:	$7,21 \times 10^7$	100,00

SAÍDAS ENERGÉTICAS			
ITEM	**QUANT./ha.**	**Valor Energético**	**TOTAL SAÍDA**
Batata prod.	24000 kg.	3851,9 kJ/kg.	$9,24 \times 10^7$ kJ/ha

Índices do Cenário 1	
Produção Total:	24000 kg.
kcal saída / kcal entrada:	1,28
kcal saída / horas trabalhadas:	95698 kcal/h
kcal entrada / kg batata produzida:	3009 kJ/kg

Quadro 5 - Entradas e saídas energéticas por 1 ha. de cultivo Cenário 2 (sem irrigação)

ENTRADAS ENERGÉTICAS			
ITEM	**QUANT./ha.**	**kJ/ha.**	**%**
Mão de Obra	1264 h.	--	--
Trator (comb.)	--	--	--
Adubos	3000 kg.	$1,36 \times 10^7$	38,87
N(4)	120 kg.	$6,03 \times 10^6$	17,15
P(16)	480 kg.	$6,03 \times 10^6$	17,15
K(8)	240 kg.	$1,60 \times 10^6$	4,57
Irrigação (comb.)	--	--	--
Calcário: Ca-Mg	2000 kg.	$2,64 \times 10^6$	7,52
Cobertura	500 kg.	--	--
20% N	100 kg.	$5,02 \times 10^6$	14,30
Inseticida	22,5 kg.	$8,21 \times 10^6$	23,35
Sementes	2400 kg.	$5,61 \times 10^6$	15,96
	TOTAL:	$3,51 \times 10^7$	100,00

SAÍDAS ENERGÉTICAS			
ITEM	**QUANT./ ha.**	**Valor Energético**	**TOTAL SAÍDA**
Batata prod.	15.000 kg.	3.851,9 kJ/kg.	$5,78 \times 10^7$ kJ/ha.

Índices do Cenário 2	
Produção Total:	15.000 kg.
kcal saída / Kcal entrada:	1,64
kcal saída / horas trabalhadas:	45.711,5 kcal/h
kcal entrada/ Kg batata produzida:	2341,8 kJ/kg.

ANÁLISE ECONÔMICA

Um importante fator no gerenciamento de práticas e usos agrícolas, viabilizando uma maior qualidade e produtividade em cultivos é a analise econômica. Através da metodologia energética em estudo, nos é possível transformar equivalentes energéticos em equivalentes econômicos, possibilitando uma visão mais geral do contexto. Tal transformação é possível de ser realizada, devido a relação existente entre Taxa Equivalente de Petróleo (TEP) e kJ, onde:

1 TEP = 4,522 X 10^7 kJ = U$ 100 (Bal. Energ. Nacional, 1995)

A seguir os quadros 6 e 7 nos mostram a equivalência entre TEP e kJ, baseados nos quadros 4 e 5 respectivamente, mostrados anteriormente.

Quadro 6 - Estudo econômico das entradas e saídas energéticas por 1 ha. de cultivo.

Cenário 1 (com irrigação)

ENTRADAS ENERGÉTICAS				
ITEM	**kJ/ha.**	**TEP**	**%**	**U$$**
Mão de Obra	--	--	--	--
Trator (comb.)	5,73 x1 0^5	0,013	0,68	1,3
Adubos	1,36 x 10^7	0,302	15,90	30,2
N(4)	6,03 x 10^6	0,133	7,00	13,3
P(16)	6,03 x 10^6	0,133	7,00	13,3
K(8)	1,60 x 10^6	0,036	1,89	3,6
Irrigação (comb)	3,40 x 10^7	0,752	39,60	75,2
Calcário:Ca-Mg	2,64 x 10^6	0,058	3,05	5,8
Cobertura	--	--	--	--
20% N	5,02 x 10^6	0,111	5,85	11,1
Inseticida	9,08 x 10^6	0,201	10,58	20,1
Sementes	7,24 x 10^6	0,160	8,43	16,0
Total	7,21 x 10^7	1,899	100	189,9
SAÍDAS ENERGÉTICAS				
ITEM	**Valor Energético**	**TEP**	**U$$**	
Batata produzida	3851,9 kJ/kg.	2,04	204,4	

Quadro 7 - Estudo econômico das entradas e saídas energéticas por 1 ha. de cultivo.

Cenário 2 (sem irrigação)

ENTRADAS ENERGÉTICAS				
ITEM	**kcal/ha.**	**TEP**	**%**	**U$$**
Mão de Obra	--	--	--	--
Trator (comb.)	--	--	--	--
Adubos	1,36 x 10^7	0,302	28,01	30,2
N(4)	6,03 x 10^6	0,133	12,34	13,3
P(16)	6,03 x 10^6	0,133	12,34	13,3
K(8)	1,60 x 10^6	0,036	3,34	3,6
Irrigação (comb.)	--	--	--	--
Calcário: Ca-Mg	2,64 x 10^6	0,058	5,38	5,8
Cobertura	--	--	--	--
20% N	5,02 x 10^6	0,111	10,30	11,1
Inseticida	8,21 x 10^6	0,181	16,79	18,1
Sementes	5,61 x 10^6	0,124	11,50	12,4
Total	3,51 x 10^7	1,078	100,00	107,8
SAÍDAS ENERGÉTICAS				
ITEM	**Valor Energético**	**TEP**	**U$$**	
Batata produzida	3.851,9 kJ/kg.	1,28	128	

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS:

Enfoque energético

A análise energética permite que se faça uma comparação entre os cenários envolvidos. Permite também que, ao se visualizar o percentual de cada entrada energética no sistema, se avaliem ações possíveis no sentido de minimizar tais gastos melhorando a produtividade e qualidade do sistema. Os comentários a seguir são pertinentes aos resultados obtidos, procurando demonstrar as afirmações anteriores, bem como as possibilidades inauguradas pela análise energética de ser uma importante ferramenta na otimização da produção agrícola:

- verificando-se os índices dos cenários 1 e 2 nota-se que o cenário 1 é mais intensivo energéticamente por kg. de batata produzido, isto é, 3009,3 contra 2341,8 kJ/kg., ou seja 1,29 vezes maior (quadro 4 e 5);
- a relação produção/insumo energético do cenário 1 é menor do que sua correspondente no cenário 2: 1,28 contra 1,64. A produtividade agrícola do cenário 1 é maior, 24000 kg./ha. contra 15000 kg./ha., ou seja, 1,6 vezes mais elevada, mas, às custas de um gasto energético específico 1,28 vezes maior. Tudo parece indicar que nesse caso o cenário 1 é mais indicado que o cenário 2, tendo em vista considerações energéticas. Equivalentes econômicos seriam úteis para melhor precisão de tais relações;
- o cenário 1 é fortemente penalizado pelos gastos com combustível para irrigação 47,08% (quadro 4). Isso indica um candidato potencial a um estudo mais detido. O consumo de combustível é função das condições de operação da bomba utilizada (η_b) e da altura manométrica dada. A bomba típica utilizada nesse cenário apresenta, sob condições dadas, uma eficiência de 0,58. A altura manométrica típica média é de 65 metros sendo função da topografia do terreno e do sistema de irrigação empregado (irrigação por aspersão, no caso). Um processo de racionalização do sistema de irrigação pode melhorar acentuadamente esse consumo, o mesmo valendo para estudos sobre a possibilidade de utilização de outras bombas tendo em vista uma dada configuração do sistema e a topografia envolvida. Nos Estados Unidos a eficiência média de bombeamento é de 0,70, segundo Pimentel (1980). Admita-se uma melhora do sistema de irrigação que resulte em uma altura manométrica da ordem de 55 metros. Nesse caso, o consumo de óleo seria de 602,29 litros (redução de 15%) mantidos os demais parâmetros (é de supor que a bomba comportar-se-ia de forma distinta sob a nova condição e, é obvio que a mudança seria favorável apenas se η_b permanecesse constante ou aumentasse);
- relações de adubação são difíceis de se alterar substancialmente ainda que tal possibilidade exista. A esse respeito Pimentel (1980) apresenta um estudo interessante sobre milho. Essas considerações são válidas para os cenários desse estudo no que diz respeito à possibilidade de se avaliar efeitos de alterações sobre os resultados da cultura. Nota-se que ambos utilizam as mesmas quantidades de adubos e que o cenário 2 é o mais penalizado deles com 38,87%, (quadro 4);
- os inseticidas penalizam acentuadamente o cenário 2 e poder-se-ia agir nesse caso, via racionalização do seu

uso. Novamente com cuidados de se verificar até que nível essas ações afetariam a produtividade e, a qualidade final do produto;

- comparando-se os resultados determinados para Itajubá com aqueles obtidos em quatro estados americanos segundo Pimentel (1980), conforme quadro a seguir, podem ser tiradas conclusões interessantes:

Quadro 8 - Comparação de resultados

Cenário	Consumo Específico (kJ/kg.)	Cons. Combust (kJ/kg.)	Produtivid. (kg./ha.)	Mão de Obra (horas)
Itajubá - 1	3.009,3	1.398,6	24.000	966
Itajubá - 2	2.341,8	--	15.000	1.264
*Califórnia	1.565,7	548,5	36.736	62
*Maine	1.783,5	515,3	23.689	89
*Idaho	3.081,3	1.204,3	26.720	62
*N. York	1.876,8	531,2	34.469	35

* Utilizam energia elétrica como parcela das entradas energéticas.

Aparentemente a menor intensidade energética da lavoura americana de batata pode ser explicada basicamente pelo alto emprego de sistemas de irrigação otimizados, inclusive com o uso de energia elétrica, com eficiência maiores. Provavelmente a topografia dos estados citados também afeta favoravelmente o consumo na irrigação. Outro fator que contribui para elevar o consumo energético no contexto do Sul de Minas é a maior aplicação de adubo fosforoso e calcário, uma imposição das características do solo.

- Resultados para a cultura da batata de São Paulo são apresentados por Castanho Filho & Chabariberi (1982), obtendo-se para o consumo energético total 5,99 x 10^7 kJ/ha. e para a relação produção/insumo, 1,06. Infelizmente os dados um pouco desagregados não permitem grandes inferências mas, sua comparação com índices análogos do presente estudo mostra que a relação entre eles é constante significando que os procedimentos culturais em São Paulo e Minas Gerais, embora com resultados agrícolas distintos, possuem componentes energéticos semelhantes.

- Apesar de não ter sido considerado a mão de obra no modelo estudado, pelos motivos já explicitados anteriormente, a relação entre energia de saída com as horas trabalhadas do cenário 1 é duas vezes maior que no cenário 2 , comprovando aí a sua maior intensidade energética.

Enfoque econômico

Do ponto de vista da análise econômica (quadro 6 e 7), há de se destacar um maior consumo de capital no cenário 1, como era de se esperar, entretanto, há a compensação de uma maior produtividade. Mas, o mais relevante, é a possibilidade de determinar o peso relativo de cada item nos contextos analisados. Assim, no cenário 1, existem fortes candidatos a medidas de racionalização, como por exemplo: adubos (peso de 15,90 %), a irrigação (39,60 %), inseticidas (10,58 %). Obviamente, as ações tomadas nesses casos devem ser efetuadas sem prejuízos na qualidade e produtividade do contexto. Observa-se uma participação elevada do item irrigação, no cenário 1 e, afortunadamente é aí que residem as melhores possibilidades de atuação, seja no rearranjo do traçado das tubulações, otimização de bombas, métodos de irrigação, etc. No cenário 2, observamos uma maior participação de adubos (28,01 %) e inseticidas (16,79 %), onde as ações de otimização são mais delicadas pois, eventuais descuidos nessas áreas, podem comprometer a qualidade e produtividade no cultivo.

É possível também, notar que apesar do maior valor econômico agregado no cenário 2, a diferença não é significativa, considerando-se que há um ganho de produtividade, de quase 60 % a favor do cenário 1.

Uma análise econômica completa, a fim de se estabelecer preços de custeio, deve necessariamente conter todos os demais custos da produção, tais como: mão-de-obra, aquisição de sementes, defensivos e adubos. É um passo adicional na análise energo-econômica mostrada e, um subproduto refinado da metodologia aqui apresentada, permitindo um maior e melhor controle dos custos de produção e, o estabelecimento de um preço final mais adequado.

CONCLUSÃO

A finalidade de se apresentar a análise energética e de se desenvolver o estudo apresentado é fornecer subsídios adequados para ações típicas de campo, visando melhoria dos padrões de utilização energética na agricultura do país. Com isso inaugura-se a possibilidade de se manipular eventos, visando melhorias na qualidade e produtividade de cultivos agrícolas. O que se deve notar é que a metodologia é uma ferramenta extremamente poderosa nesse sentido, pois identifica com clareza práticas inadequadas, inseticidas e adubos mal utilizados e, o mais importante é que aponta os diversos eventos com os respectivos percentuais de participação energética no cultivo. Sendo assim, a metodologia energética passa a ser um importantíssimo meio de controle e avaliação de práticas e usos agrícolas, fornecendo uma base sólida de sustentação para ações de engenharia envolvidas na busca de melhoria de qualidade e produtividade de cultivos agrícolas. Além do mais, deve-se notar que a transformação dos equivalentes energéticos em equivalentes econômicos, baseada numa relação conhecida e já testada (TEP), permite uma melhor administração e controle das culturas em nível financeiro. Com resultado tem-se uma visão melhorada dos custos das culturas envolvidas e, do preço final do produto para a venda, o que constitui sem dúvida um passo adicional a favor do controle e administração das culturas.

BIBLIOGRAFIA

GRAWER, E.A.; GODOY JR.C.; 1967; "Culturas da Fazenda Brasileira"; Ed. Melhoramentos; 4 edição; São Paulo.

FUNDAÇÃO IBGE; 1985, " Anuário Estatístico do Brasil - 1984 "; Secretaria do Planejamento da Presidência da República; Fundação IBGE; V.45; Rio de Janeiro.

PIMENTEL, D., 1980, " Handbook of Energy Utilization in Agriculture "; CRC Press; Florida; USA.

EMATER/EMBRAPA; 1977," Sistemas de Produção para a cultura da Batata "; Cambuquira; Minas Gerais; EMATER/EMBRAPA, ; Boletim número 100.

CASTANHO FILHO,E.P.; CHABARIBERI,D.; 1982, " Perfil Energético da Agricultura Paulista "; Instituto de Economia Agrícola; São Paulo.

Brasil, Ministério de Minas e energia, 1995,*Balanço Energético Nacional*, , Brasília, p p 141 .

ABSTRACT

It was developed, in the present paper, an energetic model methodology for agricutural cultivations. It consist on generalized transformation of imput and output in enegetic equivalents that, later can be turned into economic equivalents. The methodology was applied in two typical agricultural site, showing how it can be useful in the management of such cultivations. This model is a powerful auxiliary tool in the quality control and agricultural cultivation productivity. Once the energetical mapping out has been made it allow us to achieve the verification and assessment of cultivation techniques, use of defensives and fertilizers, irrigation systems, bringing the engineering techniques to country and, allowing to improve, to modify and to experience new techniques, fertilizers, denfensives and irrigation systems arrangements.

ESTUDO DE POSSIBILIDADES DE INCREMENTO DA COGERAÇÃO EM USINAS AÇUCAREIRAS CUBANAS

Eduardo Rafael Barreda del Campo
Jorge Llagostera
Departamento de Energia, Faculdade de Engenharia Mecânica
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Caixa Postal 6122 - CEP 13083-970 - Campinas - SP - Brasil

RESUMO

Neste trabalho são avaliadas três configurações de sistemas de cogeração em usinas de açúcar, visando a produção de excedentes de energia elétrica passíveis de comercialização. Foi estudada a influência dos parâmetros do vapor, da eficiência das caldeiras e, para as configurações de melhor desempenho, a dependência da geração de eletricidade em função da demanda de vapor de processo. Foi efetuada uma análise exergética das alternativas mais significativas e, finalmente, uma avaliação econômica das configurações que se apresentaram como mais promissoras.

INTRODUÇÃO

A cogeração constitui atualmente uma tecnologia bem conhecida e difundida em muitos setores industriais, encontrando também grande aplicabilidade no setor terciário. O setor açucareiro, bem como o setor da indústria de papel e celulose, da indústria qúimica e outros, apresentam grande atratividade para a implementação da cogeração, dado o grande volume de vapor requerido pelos seus respectivos processos de produção. O setor açucareiro apresenta a grande vantagem da disponibilidade do bagaço de cana como combustível para a geração de vapor, possibilitando a geração de energia elétrica a custos competitivos, em relação à produção baseada em derivados de petróleo (Azor, 1991). O setor açucareiro cubano conta com 158 usinas, sendo que 146 (92,4%) utilizam a cogeração, estando interligadas ao sistema elétrico nacional 83 usinas (56,8%), demonstrando a importância da cogeração nesse setor (Sieckza, 1992).

O dimensionamento da cogeração em qualquer indústria depende diretamente do consumo de vapor do processo, de seus parâmetros tecnológicos e da disponibilidade e custo do combustível (Bouvet, 1992). O objetivo deste trabalho é avaliar diferentes esquemas para o sistema de cogeração em indústrias açucareiras, visando o aumento da produção de energia elétrica, para o atendimento da demanda própria da usina e para comercialização (Barreda del Campo, 1995).

Para a análise das diferentes alternativas foi desenvolvido um programa computacional para a modelagem dos diversos casos estudados, composto por subrotinas correspondentes aos diversos tipos de componentes. As propriedades termodinâmicas da água foram determinadas a partir de subrotinas elaboradas anteriormente (Llagostera, 1994) com base nas correlações de Keenan et al. (1978).

ANÁLISE TERMODINÂMICA

Variantes Analisadas. Para a escolha das configurações a serem analisadas visando a obtenção de excedentes de energia elétrica, o estudo foi baseado no parâmetros de uma usina cubana cujas características, em termos de capacidade de moagem e potência instalada, a tornam interessante como um referencial de comparação. O esquema térmico correspondente a essa usina é o designado como variante 1, sendo as outras duas variantes definidas com base na literatura e em trabalhos realizados com objetivos similares. Desse modo, foram estudados três esquemas térmicos, caracterizados a seguir:

- variante 1: usina de referência, correspondente à Figura 1;
- variante 2: todo o vapor do sistema é gerado a uma só pressão (alta pressão), apresentada na Figura 2;
- variante 3: apenas o vapor que é utilizado para produzir energia elétrica adicional é gerado a alta pressão, o restante do vapor é gerado em caldeiras de média pressão existentes anteriormente, esquematizada na Figura 3.

Como pode ser observado por meio das figuras citadas a diferença básica entre a variante um e três é a presença nesta última do turbogerador dois (TG 2), aumentando a capacidade de geração de energia elétrica. Na variante dois, diferentemente do verificado nas variantes um e três, todo o vapor utilizado na usina é gerado em caldeiras de alta pressão e de eficiência superior. A variante 2 apresenta também um turbogerador adicional em relação à variante 1. Em todas as variantes, a jusante do ponto de alimentação das moendas é mantida a mesma estrutura de parâmetros de processo. Nessas figuras "FONT" e "SORV" representam reposição ou perda de água, respectivamente, enquanto "SRB" inclui as bombas e o desaerador.

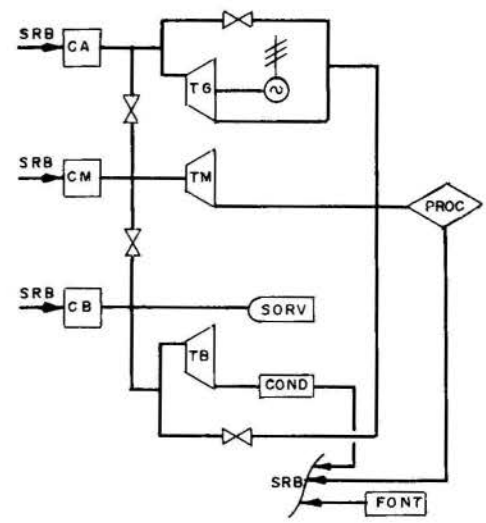


Figura 1 - Fluxograma simplificado da variante 1.

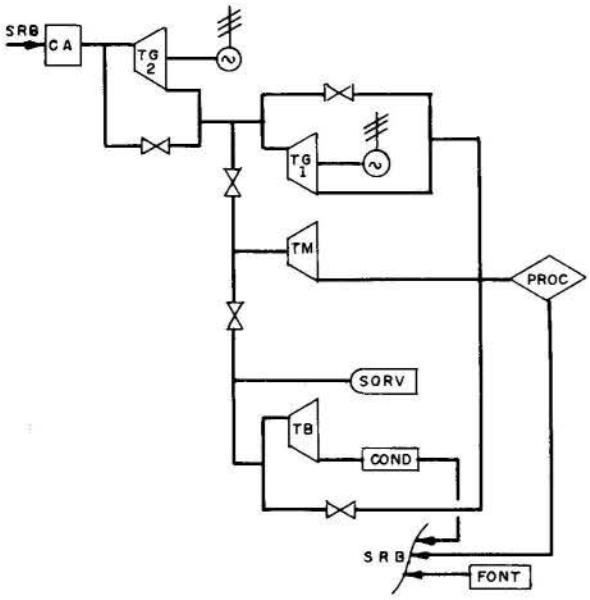


Figura 2 - Fluxograma simplificado da variante 2.

Para a realização das diferentes avaliações foi necessário fixar diversos parâmetros de operação, mantidos ao longo do trabalho. Esses valores foram obtidos a partir de dados reais de operação de usina, ou estabelecidos com base na literatura, incluindo dados do IPT (1990) e da COPERSUCAR(1991).

Para a análise comparativa foram consideradas cinco condições de pressão e temperatura, definindo-se as configurações relacionadas na Tabela 2, a partir das variantes citadas. A configuração denominada "Padrão" é a mais difundida na indústria açucareira cubana. A configuração "Atual" corresponde aos parâmetros da usina escolhida como referência e ponto de partida do estudo. Para a variante 1 foram consideradas três condições para o vapor gerado nas caldeiras "CA". Para as variantes 2 e 3, no turbogerador 2, considerou-se duas possibilidades: expansão do vapor de 6,2 MPa até 2,8 MPa e de 8,0 MPa até 2,8 MPa, considerando no restante do esquema os níveis de pressão do esquema inicial.

Influência dos parâmetros do vapor na geração de excedentes de eletricidade. Para esta avaliação foi definido o consumo de vapor de processo de 500 kg de vapor para cada tonelada de cana processada, valor representativo deste tipo de usina, além das condições anteriormente fixadas.

Tabela 1 - Parâmetros de operação

Capacidade de moagem da usina (t/h)	383
Fluxo máximo de vapor no turbogerador 1 (t/h)	113
Fluxo de escape das turbomoendas (kg/s)	20 - 21
Retorno de condensado do processo (%)	95
Condições do vapor de processo (°C), (MPa)	130, 0.175
Eficiência das caldeiras de alta pressão (%)	82
Eficiência das caldeiras de baixa pressão (%)	75
Eficiência global do turbogerador (%)	70 - 72
Eficiência das turbomoendas (%)	50 - 55
Pressão de entrada das turbomoendas P1 (MPa)	1,75
Pressão na saída das turbomoendas P2 (MPa)	0,175
Temperatura - entrada das turbomendas T1 (°C)	320
Temperatura na saída das turbomoendas T2 (°C)	190

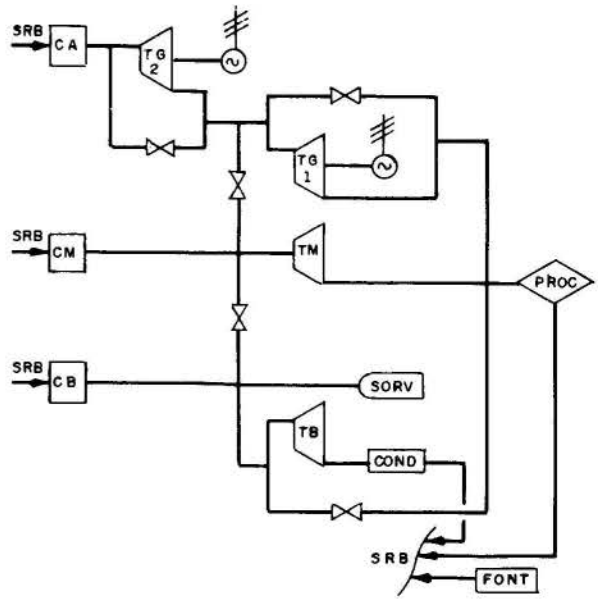


Figura 3 - Fluxograma simplificado da variante 3.

As possibilidades de geração de potência elétrica para as diversas configurações são apresentadas na Tabela 3, em termos da potência obtida em cada nível de pressão e sua totalização. Nessa tabela a última coluna apresenta o incremento percentual da geração total de potência elétrica de cada uma das configurações em relação à denominada "Padrão".

A possibilidade de geração de potência elétrica aumenta em decorrência da elevação dos níveis de pressão e temperatura do vapor, o que eleva seu conteúdo exergético. As configurações que utilizam mais intensamente o vapor de 8,0 MPa e 485°C, apresentam assim maior potencial de produção de energia elétrica.

Destaca-se em têrmos de produção de potência elétrica a configuração 5 (variante 2), para a qual é possível um incremento na geração de potência de 144% em relação à configuração Padrão. Nessa variante todo o vapor gerado nas caldeiras é utilizado para o acionamento dos turbogeradores, o que não ocorre com as demais, onde uma parte do vapor gerado é utilizado diretamente para o acionamento das turbomoendas.

Influência do aumento da eficiência do gerador de vapor no consumo de bagaço. As condições de simulação são as mesmas consideradas na avaliação anterior. Inicialmente foi efetuada adotando eficiência das caldeiras de alta pressão igual a 82 % e para as de média pressão 75 %.

Tabela 2 - Variantes e configurações consideradas

Variante	Configuração	Pressão (MPa)	Temperatura (°C)
1	Padrão	1,8	320
1	Atual	2,8	400
1	1	4,2	390
1	2	6,2	450
1	3	8,0	485
2	4	6,2	450
2	5	8,0	485
3	6	6,2	450
3	7	8,0	485

Tabela 3 - Produção de potência elétrica

Config.	Pressão (MPa)	Ger. de Vapor (t/h)	Potência Elétrica (kW)	Pot. El. Total (kW)	Increm. Pot. El. (%)
Padrão	1,82	109,4	8829	8829	
Atual	2,8	109,4	11831	11831	34
1	4,2	109,4	12891	12891	46
2	6,2	109,4	15400	15400	74
3	8,0	109,4	16982	16982	92
4	6,2	186,3	8234		
	2,8	111,78	11407	19641	123
5	8,0	176,9	10601		
	2,8	106,14	10964	21565	144
6	6,2	132,3	5848		
	2,8	76,93	7782	13630	54
7	8,0	121,5	6795		
	2,8	108	10527	17322	96

Os resultados foram comparados com os obtidos a partir de eficiências de 86 % e de 82 % respectivamente. O consumo de bagaço obtido para as diversas configurações é apresentado na Tabela 4.

Em todas as configurações, à medida em que aumenta a eficiência das caldeiras observa-se uma redução significativa do consumo de bagaço, e consequentemente, a elevação dos níveis de excedentes. Essas reduções no consumo são mais acentuadas nas configurações que apresentam os dois tipos de caldeiras, com os respectivos níveis de eficiência, pois o ganho de eficiência considerado para as caldeiras de média pressão foi superior ao considerado para as caldeiras de alta pressão.

Análise da variação da produção de eletricidade e do excedente de bagaço em função do consumo de vapor de processo. Nesta análise, foram consideradas as variantes 1 e 2 . A primeira porque representa o esquema típico de usina, e a segunda por ser a variante que proporciona maior aumento na produção de potência elétrica. O estudo foi feito para diversos níveis de consumo de vapor de processo, considerando estável o consumo de vapor das moendas. Para o cálculo do excedente de bagaço considerou-se que a produção bruta de bagaço da usina corresponde à 25% em massa do total de cana processada pela usina. A Tabela 5 apresenta os resultados obtidos.

Ao aumentar o consumo de vapor de processo, aumenta a produção de eletricidade, sendo este incremento acentuado na medida em que se elevam os parâmetros do vapor. O aumento do consumo de vapor de processo eleva a geração de vapor das caldeiras, conduzindo à diminuição do excedente de bagaço.

No caso da variante 1 o consumo de vapor de processo só poderia ser aumentado até a faixa de 520-560 kg de vapor de processo/t de cana, dependendo da pressão em que esteja trabalhando o esquema, já que aumentos superiores a este valor provocam valores negativos de excedente de bagaço, o que implicaria na aquisição suplementar de bagaço para produzir esse vapor. No caso da variante 2 esta situação acontece a partir de consumos superiores 530 kg de vapor de processo/ t de cana .

Tabela 4 - Consumo de bagaço para diferentes eficiências de caldeiras

Config.	Consumo Bagaço (t/h) Eficiências 82 e 75 %	Consumo Bagaço (t/h) Eficiências 86 e 82 %	Redução Consumo Bagaço (%)
P	89,0	83,6	6,06
A	92,4	86,8	6,03
1	91,3	85,8	6,02
2	93,7	88,1	5,99
3	95,0	89,3	6,02
4	93,4	89,0	4,66
5	92,5	86,5	6,4
6	77,3	73,1	5,49
7	93,1	89,4	3,91

Tabela 5 - Produção de Eletricidade e Excedente de Bagaço

Config.	Vapor Proc./ Cana Moída (kg/t)	Potência Elétrica (kW)	Potência/ C. Moída (kW/t)	Bagaço Exced. (%)
Padrão	300	2618	6,83	42,15
"	400	5526	14,43	24,69
"	500	8829	23,05	7,02
"	600	11560	30,18	-7,72
Atual	300	3680	9,6	41,43
"	400	7009	18,30	23,76
"	520	11831	30,89	3,52
"	600	14942	39,01	-9,72
1	300	4089	10,68	41,53
"	390	7985	20,85	23,44
"	500	12891	33,66	4,64
"	600	16968	44,30	-10,96
2	300	5125	13,38	41,03
"	390	9265	24,19	22,56
"	500	15400	40,21	2,16
"	590	19793	51,68	-12,4
3	300	5560	14,52	40,82
"	400	10081	26,32	21,96
"	500	16982	44,34	0,76
"	600	21705	56,67	-13,72
4	300	8226	21,47	40,6
"	400	13157	34,35	23,32
"	500	19641	51,28	2,48
"	600	24177	63,12	-12,12
5	300	9811	25,62	40,97
"	400	15332	40,03	23,6
"	500	21565	56,30	3,44
"	600	26902	70,24	-11,68

Análise exergética. Para realização da mesma foram selecionadas três configurações: a "Padrão" como nível de referência, a configuração 5 (a de melhor resultado em termos de produção de eletricidade) e a configuração 3, cujos parâmetros são os mesmos da 5, para comparação. Foi incluído também o consumo de potência de bombeamento para cada uma das variantes. A eficiência das bombas foi considerada igual a 85 %. O cálculo do fluxo de exergia do vapor foi feito através da exergia física referida à temperatura de 25°C e pressão de 1 atm, de acordo com o apresentado por Kotas (1985) e Moran & Sciubba (1994).

$$e_f = (h - h_0) - T_0(s - s_0) \text{ , com} \quad (1)$$

h - entalpia específica do vapor;
s - entropia específica do vapor;

Tabela 6 - Fluxos de exergia para a configuração "Padrão" (1,8 MPa, 320°C)

Fluxo de exergia	(MW)	(%)
Produção total de bagaço (PCS)	250,7	100
Fluxo de água às caldeiras	2,49	0,99
Excedente de bagaço	31,8	12,7
Fluxo de vapor das caldeiras de alta	38,4	15,3
Perdas nas caldeiras de alta	103,8	41,4
Fluxo de vapor nas caldeiras de baixa	20,4	8,14
Perdas nas caldeiras de baixa	59	23,5
Fluxo de vapor ao turbogerador	31,1	12,4
Perdas no turbogerador	2,5	0,99
Potência do turbogerador	8,8	3,51
Fluxo de vapor à moenda A	9,1	3,63
Perdas na moenda A	1,2	0,48
Potência da moenda A	1,8	0,72
Fluxo de vapor à moenda B	12,1	4,83
Perdas na moenda B	1,6	0,64
Potência da moenda B	2,5	0,99
Fluxo de vapor à turbo-bomba	3,4	1,36
Perdas na turbo-bomba	0,4	0,16
Potência da turbo-bomba	0,56	0,22
Fluxo de vapor ao processo	34,3	13,7

Tabela 7 - Fluxos de exergia para a configuração 3 (8 MPa , 485°C)

Fluxo de exergia	(MW)	(%)
Produção total de bagaço (PCS)	250,7	100
Fluxo de água às caldeiras	2,6	1,04
Excedente de bagaço	23,1	9,21
Fluxo de vapor das caldeiras de alta	49,4	19,7
Perdas nas caldeiras de alta	101,5	40,5
Fluxo de vapor nas caldeiras de baixa	20,4	8,14
Perdas nas caldeiras de baixa	59	23,5
Fluxo de vapor ao turbogerador	40	15,9
Perdas no turbogerador	4,6	1,83
Potência do turbogerador	16,3	6,5
Fluxo de vapor à moenda A	8,9	3,55
Perdas na moenda A	1,2	0,48
Potência da moenda A	1,8	0,72
Fluxo de vapor à moenda B	11,8	4,71
Perdas na moenda B	1,5	0,59
Potência da moenda B	2,5	0,99
Fluxo de vapor à turbo-bomba	3,3	1,31
Perdas na turbo-bomba	0,3	0,12
Potência da turbo-bomba	0,5	0,19
Fluxo de vapor de processo	33,9	13,5

h_0 -entalpia da água para o estado de referência;
s_0 -entropia da água para o estado de referência;
T_0 -temperatura da água para o estado de referência.

No presente estudo, para a comparação percentual da exergia do vapor nos diversos pontos do esquema. adotou-se como base de cálculo dos percentuais o valor do poder calorífico superior do bagaço com 50% de umidade, já que a utilização da exergia química do bagaço, calculada com base em procedimentos como os apresentados por Szargut et al. (1988) conduzem a valores bastante superiores ao PCS, dificultando comparações de caráter aplicado. Os resultados são mostrados nas Tabelas 6, 7 e 8.

O processo de produção de vapor é responsável pelas maiores irreversibilidades, associadas fundamentalmente às grandes diferenças de temperaturas entre os gases de combustão e o fluido de trabalho, e também em relação ao meio ambiente. A primeira diferença pode ser minimizada com a produção de vapor a níveis superiores de temperatura e pressão. Assim, por exemplo, passando da configuração Padrão à configuração 3, verifica-se uma redução das perdas na geração de vapor da ordem de 2,3MW. O segundo lugar em nível de importância é ocupado pelas perdas no processo de produção de potência, onde as irreversibilidades estão associadas com a eficiência dos equipamentos de conversão.

Na configuração Padrão, em relação à base de comparação, 1,36 % correspondem à potência mecânica, 3,51 % à potência elétrica e 13,7 % são enviados ao processo. Na configuração 3, 1,71 % correspondem à potência mecânica, 6,5 % à potência elétrica e 13,5 % são enviados ao processo. No caso da configuração 5, 1,71 % correspondem à potência mecânica, 8,1 % à potência elétrica e 13,4 % são enviados ao processo. Esses valores evidenciam também a maior produção de potência elétrica na variante 1 em relação à variante 2.

ANÁLISE ECONÔMICA.

Para uma avaliação econômica, foram escolhidas as configurações ("Atual" e 3) da variante 1; a configuração 5 da variante 2; e a configuração 7 da variante 3. As duas últimas são as de melhores resultados em termos de geração de eletricidade.

Na variante 1, foi escolhida a configuração 3 por apresentar os mesmos parâmetros que a 5 e 7, e também a Atual, como uma referência para comparação.

Foram obtidas informações sobre os custos dos equipamentos básicos para a implementação de cada uma das variantes. As principais fontes consultadas foram a empresa DEDINI, o relatório COPERSUCAR (1991) sobre geração de energia elétrica em usinas e destilarias, e o trabalho de Walter (1994).

A Tabela 9 apresenta os custos do investimento total necessário para cada uma das configurações analisadas.

Tabela 8 - Fluxos de exergia para a configuração 5 (8 MPa, 485°C)

Fluxo de exergia	(MW)	(%)
Produção total de bagaço (PCS)	250,8	100
Fluxo de água às caldeiras	2,8	1,12
Excedente de bagaço	25,2	10,05
Fluxo de vapor de 8 MPa	74,1	29,5
Perdas nas caldeiras	154,3	61,5
Fluxo de vapor ao turbogerador 2	66,7	26,6
Perdas no turbogerador 2	2,02	0,8
Potência do turbogerador 2	10,1	4,03
Fluxo de vapor ao turbogerador 1	31,8	12,7
Perdas no turbogerador 1	2,9	1,16
Potência do turbogerador 1	10,2	4,06
Fluxo de vapor ao dosador 1	19,4	7,73
Fluxo de vapor à moenda A	9,1	3,63
Fluxo de vapor à moenda B	12,1	4,82
Perdas na moenda A	1,2	0,48
Potência da moenda A	1,8	0,71
Perdas na moenda B	1,5	0,59
Potência da moenda B	2,5	0,99
Fluxo de vapor à turbo-bomba	3,4	1,35
Perdas na turbo-bomba	0,3	0,12
Potência da turbo-bomba	0,5	0,19
Fluxo de vapor ao processo	33,7	13,43

Tabela 9 - Investimento total

Variante	Configuração	Investimento (10^6US$)
1	Padrão	8,923
1	Atual	9,998
1	3	20,414
2	5	25,158
3	7	22,353

A análise foi feita mediante uma comparação dos investimentos diferenciais em relação à configuração Padrão, e dos correspondentes diferenciais em termos de produção de potência elétrica e geração de excedentes de bagaço. Desta forma o enfoque é dirigido a uma relação direta entre diferenças relativas aos investimentos e diferenças na produção de eletricidade e bagaço. A Tabela 10 mostra alguns resultados desta comparação.

Os valores apresentados correspondem ao resultado da subtração dos valores correspondentes à configuração Padrão dos valores respectivos de cada uma das configurações. Os valores com sinal negativo no diferencial de excedente de bagaço de algumas configurações indicam que as mesmas apresentam menores excedentes de bagaço do que a configuração Padrão.

Na Tabela 11 é apresentado o diferencial específico obtido em relação à configuração Padrão em termos de potência elétrica produzida por tonelada de cana processada. Na mesma tabela é apresentado o diferencial de investimento em relação à configuração Padrão dividido pelo diferencial de potência obtido em relação à configuração Padrão.

Observa-se que a configuração 5 apesar de ser a que apresenta maior produção de energia elétrica, tem uma relação entre os diferenciais de investimento e de potência menor que as configurações 3 e 7. A configuração Atual apresenta o menor valor para essa relação já que exige menor investimento por operar a uma pressão inferior.

A fim de comparar as alternativas em termos do tempo de retorno dos diferenciais de investimento, foi necessário estabelecer valores de referência para o bagaço e para a energia elétrica excedente passível de comercialização. O valor do bagaço foi fixado em 4,86 US$/t, valor estabelecido em Cuba. O valor da energia elétrica foi estabelecida com base nas tarifas horárias vigentes em Cuba: 28 US$/MWh das 6 às 18 horas; 84,2 US$/MWh das 18 às 22h, e 15 US$/MWh. Os custos anuais de manutenção e de operação foram adotados como sendo 2,3% do investimento total. O consumo próprio de energia elétrica da usina foi fixado em 12 kWh por tonelada de cana processada (CPFL, 1987). Considerou-se uma duração de safra igual a 150 dias, que é o valor típico em Cuba. A Tabela 12 mostra os resultados, obtidos com base nos diferenciais em relação à configuração Padrão

Tabela 10 - Comparação das configurações em relação à configuração Padrão (valores globais)

Configuração	Diferencial de investimento (10^6 US$)	Diferencial de potência elétrica (kW)	Diferencial de excedente de bagaço (t/h)
Atual	+1,075	+1483	-0,87
Conf.3 (var1)	+11,820	+4555	-2,6
Conf.5 (var2)	+18,749	+9806	-1,52
Conf.7 (var3)	+13,430	+4508	+2,85

Tabela 11 - Comparação das configurações em relação à configuração Padrão (índices)

Configuração	Diferencial específico (kWh/t)	Dif. Inv./ Dif. Pot. Elétr. (US$/kW)
Atual	+3,87	725
Conf.3(var1)	+11,89	2523
Conf.5(var2)	+25,60	1912
Conf.7(var3)	+11,77	2979

Os valores de I/R obtidos são bastante elevados, indicando períodos de retorno muito extensos. O menor valor de I/R obtido foi de 10,59 (configuração Atual), que proporcionaria, a uma taxa de 9%, um período de retorno de 36 anos, o que não justificaria o investimento diferencial.

A fim de aliviar o impacto dos investimentos necessários considerou-se então, para as configurações 3, 5 e 7, a opção de instalação de uma única caldeira de 100 t/h ao invés de duas caldeiras de 50 t/h, possibilitando uma redução no investimento de 2,5 10^6US$. Ainda assim os períodos de retorno obtidos foram demasiadamente longos. Ficou evidenciado que esses investimentos diferenciais em relação à configuração Padrão só poderiam ser justificados, nessas condições, se comparados com instalações de produção de potência que apresentassem características econômicas ou ambientais menos adequadas.

Influência do preço do bagaço na relação I/R. Considerou-se interessante averiguar a influência da variação do valor do bagaço sobre a receita, e por conseguinte sobre a relação I/R. Já considerando a redução no investimento referida no ítem anterior, estudou-se o efeito do alteração do valor do bagaço para 10 US$/t. Os resultados diferenciais relativos à configuração Padrão são apresentados na Tabela 13.

Apenas para a configuração 7 há uma melhora da relação I/R, em relação à configuração Padrão, já que as outras configurações apresentam menores excedentes de bagaço que a configuração padrão. Ainda assim essa melhora não é suficiente para viabilizar um período de retorno razoável.

Influência do preço da energia elétrica na relação I/R. Foi também avaliado o efeito da variação do valor da energia elétrica, considerando sua variação a partir do valor médio (ponderado) atual de 34,6 US$/MWh até 150 US$/MWh. Neste caso

Tabela 12 - Investimento total, despesas anuais e receitas anuais diferenciais em relação à configuração Padrão (10^3US$)

Conf.	I_d	D_{mod}	R_{bd}	R_{ed}	R_d	I/R
Atual	1075	24,73	-12,18	138,4	101,5	10,59
3	11820	264,3	-36,39	424,4	123,7	95,5
5	18749	431,2	-21,28	914,2	461,7	40,61
7	13430	308,8	39,89	420,8	151,8	88,45

onde:

I_d - investimento diferencial;
D_{mod} -despesa anual de manutenção e operação (diferencial);
R_{bd} - receita anual: bagaço excedente (diferencial);
R_{ed} - receita anual: energia elétrica excedente (diferencial);
R_d - receita líquida anual (diferencial);
I/R - relação investimento/receita líquida.

Tabela 13 - Investimento, despesa e receita diferenciais considerando o bagaço a 10 US$/t ($10^3US)

Conf.	I_d	D_{mod}	R_{bd}	R_{cd}	R_d	(I/R)
Atual	1075	24,73	-25,16	138,4	88,6	12,13
3	9307	214,1	-74,88	424,4	135,5	68,69
5	16235	373,4	-43,78	914,2	497,0	32,66
7	10917	251,1	82,08	420,8	251,8	43,35

foram considerados os valores de investimento, despesa e receita do bagaco já apresentados na Tabela 13. Os resultados obtidos para a relação I/R nessa avaliação são apresentados, para as diversas configurações, na Tabela 14.

Como é observado, todas as configurações atingem valores que poderiam viabilizá-las em relação à configuração Padrão (I/R≤9), para a faixa de valores considerados. A configuração 7 é a que apresenta os períodos de retorno mais longos, tornando-se minimamente atrativa a partir de 110 US$/MWh. As configurações que apresentam os melhores resultados são a Atual e a 5. Para a configuração Atual, a partir de 45 US$/MWh, o período de retorno do investimento diferencial atinge 18 anos, para taxas de 10% ao ano. Para viabilizar a configuração 5 em termos desta comparação, seriam necessários valores superiores a 80 US$/MWh, enquanto a configuração 3 necessitaria de valores superiores a 110 US$/MWh.

Tabela 14 - Relação I/R em função do valor da energia elétrica

Valor energia elétrica (US$/MWh)	Relação I/R			
	Config. Atual	Config. 3	Config. 5	Config. 7
34,6	12,11	68,52	32,61	43,28
40	9,74	46,04	25,34	34,33
50	7,15	28,65	17,94	24,83
60	5,64	20,79	13,88	19,44
70	4,66	16,31	11,32	15,98
80	3,97	13,43	9,56	13,56
90	3,46	11,41	8,27	11,78
100	3,07	9,91	7,29	10,41
110	2,75	8,77	6,51	9,33
120	2,50	7,86	5,89	8,45
130	2,28	7,12	5,37	7,72
140	2,10	6,51	4,94	7,11
150	1,95	5,99	4,57	6,59

CONCLUSÃO

Em termos energéticos a operação em níveis superiores de pressão e temperatura conduz a um aproveitamento mais completo dos recursos disponíveis, no caso o bagaço, sub-produto da moagem da cana. No entanto, pode-se concluir que, no âmbito das circunstâncias e hipóteses consideradas neste trabalho, as configurações analisadas são pouco interessantes em comparação à configuração Padrão. Os investimentos adicionais correspondentes à configuração Atual tornam-se atraentes para valores da energia elétrica a partir de 45 US$/MWh, e para a configuração 5 a partir de 80 US$/MWh. A configuração 5, que em todos os casos analisados foi a que apresentou maior produção de potência, pode ser considerada como a mais atraente das alternativas, em circunstâncias energéticas que justifiquem sua implementação.

REFERÊNCIAS

Azor, B.A., 1991, "Análisis de la cogeneración", Relatorio de la Comisión de Inspección Estatal Energética, Santiago de Cuba.

Barreda del Campo, E.R., 1995, "Avaliação das possibilidades de incremento da cogeração em usinas açucareiras cubanas", UNICAMP, Campinas. (Dissertação de Mestrado)

Bouvet, E.P., 1992, "Cogeneracion de energia eléctrica en las fábricas de azucar para la red pública de Hawai. Situación actual y perspectivas futuras", *Proceedings del Seminario Regional OLADE/CONEA*, Diciembre, pp. 453-479.

COPERSUCAR, 1991, "Geração de energia elétrica em usinas e destilarias", Relatório Técnico Econômico-Financeiro, COPER-SUCAR, Piracicaba.

CPFL, 1987, "Avaliação do potencial de cogeração no setor sucro-alcooleiro na área de concessão da CPFL: elementos para uma análise de médio e longo prazo", CPFL, Campinas.

IPT, 1990, "Conservação de energia na indústria do açúcar e do álcool", Manual de recomendações, IPT, São Paulo.

Keenan, J.H. et al., 1978, "Steam Tables", John Wiley, New York.

Kotas, T.J., 1985, "The exergy method of thermal plant analysis", Butterworths, London.

Llagostera, J., 1994, "Subrotinas computacionais de elevada exatidão para determinação de propriedades termodinâmicas da água", *Anais do V Encontro Nacional de Ciências Térmicas (V ENCIT)*, ABCM, EPUSP, São Paulo, pp. 395-398.

Moran, M.J. and Sciubba, E., 1994, "Exergy Analysis: Principles and Practice", *ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, Vol. 116, pp. 285-290.

Sieczka, E., 1992, "Cuba: Empleo de la cogeneración", *Proceedings del Seminario Regional OLADE/CONEA*, Diciembre, pp. 311 330.

Walter, A., 1994, "Viabilidade e perspectivas da cogeração e da geração termoelétrica junto ao setor sucro alcooleiro", UNICAMP, Campinas. (Tese de Doutorado)

ABSTRACT

This work evaluates three different cogeneration systems, with several configurations for sugar-cane plants, aiming to produce an excess of eletricity for commercialization. The influence of the steam generation parameters (pressure and temperature), the boiler efficiency and the dependence of the electricity generation on the demand of process steam is analyzed for the configurations of best performance. An exergy analysis and an economical evaluation is done for those configurations where the proposed objective was achieved with the best results.

AGRADECIMENTO

Os autores expressam seu agradecimento à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP, pelo auxílio prestado na forma de bolsa de mestrado concedida a Eduardo Rafael Barreda del Campo, docente da Universidad de Oriente, Santiago de Cuba.

ANÁLISE TERMOECONÔMICA DE UM SISTEMA DE COGERAÇÃO DE UMA USINA AÇUCAREIRA CUBANA

Eduardo Rafael Barreda del Campo[1,3] **Sérgio Augusto Araújo da Gama Cerqueira[2,3]** **Silvia Azucena Nebra[3]**

1 - Centro de Estudio de Eficiencia Energética - Universidad de Oriente - Santiago de Cuba - Cuba
2 - Departamento de Mecânica - FUNREI - São João del Rei - MG - Brasil
3 - Departamento de Energia - FEM - UNICAMP - Caixa Postal 6122 - CEP 13081-970 - Campinas - SP - Brasil

SUMÁRIO

A cogeração é prática corrente em usinas açucareiras. Neste trabalho, uma usina açucareira cubana típica foi analisada seguindo a metodologia de análise termoeconômica de sistemas térmicos. Dois diferentes modelos de atribuição de custos, o *método das extrações* e o *método das igualdades*, foram utilizados para a determinação dos custos exergéticos e monetários (operacionais) de cada um dos fluxos no sistema, em particular do vapor e da potência gerada. A metodologia permite assinalar os equipamentos responsáveis pelas maiores irreversibilidades no sistema.

INTRODUÇÃO

Embora a cogeração seja conhecida desde o século passado, sua difusão é relativamente recente. O limitado potencial hidroelétrico e a escassez de divisas em moeda conversível constituem estímulo para o seu emprego em Cuba, onde é muito difundida no setor açucareiro, tendo em vista a disponibilidade do bagaço, subproduto do processo industrial, para ser utilizado como combustível para a geração de vapor.

A análise termoeconômica de sistemas energéticos é uma metodologia de análise de sistemas térmicos, baseada na segunda lei da termodinâmica. A utilização desta ferramenta permite a atribuição de custos aos diferentes produtos de processos energo-intensivos, evidenciando ainda as principais fontes de irreversibilidades dos sistemas.

Em trabalho recente, Vertiola e Oliveira Jr (1995) realizaram uma análise exergética e termoeconômica de uma usina brasileira, utilizando tanto dados medidos pelos próprios autores como fornecidos pela própria empresa. Walter e Llagostera (1995) estudaram a eficiência de sistemas BIG/GT empregando gaseificadores atmosféricos e pressurizados aplicados a usinas sucroalcooleiras.

A abordagem geral utilizada neste trabalho, dentre as diversas vertentes da teoria termoeconômica, segue a proposta de Valero e Lozano (1994). No que diz respeito à distribuição de custos exergéticos, foram elaborados dois modelos. O primeiro deles segue ainda a proposta dos dois autores mencionados acima e o segundo, inspirando-se no trabalho de Reistad e Gaggiolli (1980), propõe uma distribuição de custos diferente.

BREVE DESCRIÇÃO DA INSTALAÇÃO.

A instalação tratada neste trabalho é a de um sistema de cogeração de uma usina de açúcar típica cubana. Um desenho esquemático da usina, descrita em maiores detalhes por Barreda e Llagostera (1996), é apresentado na Figura 1. A usina tem uma capacidade de moagem de 383 t / h. A umidade do bagaço que entra na caldeira é 50 %, e o teor de bagaço em cana 25 %.

A geração do vapor é feita em dois níveis: três caldeiras geram vapor a 2,8 MPa e 400 °C fornecendo 37,5 Kg/s, alimentando principalmente o turbogerador que tem uma potência nominal de 12 MW, e duas outras caldeiras, de média pressão, geram 20 kg /s de vapor a 1,8 MPa e 320 °C para as turbomoendas e as bombas Magma.

O sistema de distribuição de vapor está dotado de quatro válvulas de expansão. As válvulas 1, 2 e 4 são usadas para o abastecimento do vapor nas diversas instalações, no caso de existir déficit. A válvula de expansão 3 está sempre aberta, já que é a única forma de fornecer vapor às turbo-bombas (bombas Magma).

O processo requer 0,5 tonelada de vapor a uma pressão de 0,275 MPa e temperatura de 130 °C por tonelada de cana moída.

A usina possui 2 tandem (duas moendas), com 5 turbinas cada, garantindo a capacidade de moagem necessária. A potência do tandem A é de 1,8 MW e do tandem B de 2,5 MW. O fluxo de escape total é de 20 - 21 kg/s. A pressão e a temperatura do vapor na entrada e na saída são 1,8 MPa e 866 °C, e 0,275 MPa e 736 °C, respectivamente.

Tanto os fluxos de vapor de escape do turbogerador como o das turbomoendas são atemperados em dois desuperaquecedores com o objetivo de diminuir a temperatura do vapor até as condições do processo.

Uma parte do vapor gerado nas caldeiras de média pressão (1,8 MPa e T = 320 °C) é fornecida para o funcionamento das turbobombas. O vapor de saída passa por um condensador onde é levado até as condições de líquido saturado, retornando então ao chamado sistema de retorno e bombeamento.

O sistema de retorno e bombeamento resume todos os fluxos de água e condensado que entram e são recolhidos no sistema. A ele chega, na forma de condensado, 95 % do fluxo de vapor de baixa pressão (0,275 Mpa) que foi para o processo, o condensado proveniente do condensador das turbobombas e a água de reposição do sistema. Devido à contaminação, não há retorno do vapor de média pressão (1,14 Mpa) fornecido ao processo. Dele saem os fluxos de água que alimentam as caldeiras de alta e média pressão e a água necessária para o condicionamento do vapor aos parâmetros de processo. A potência total de bombeamento é de 184 KW.

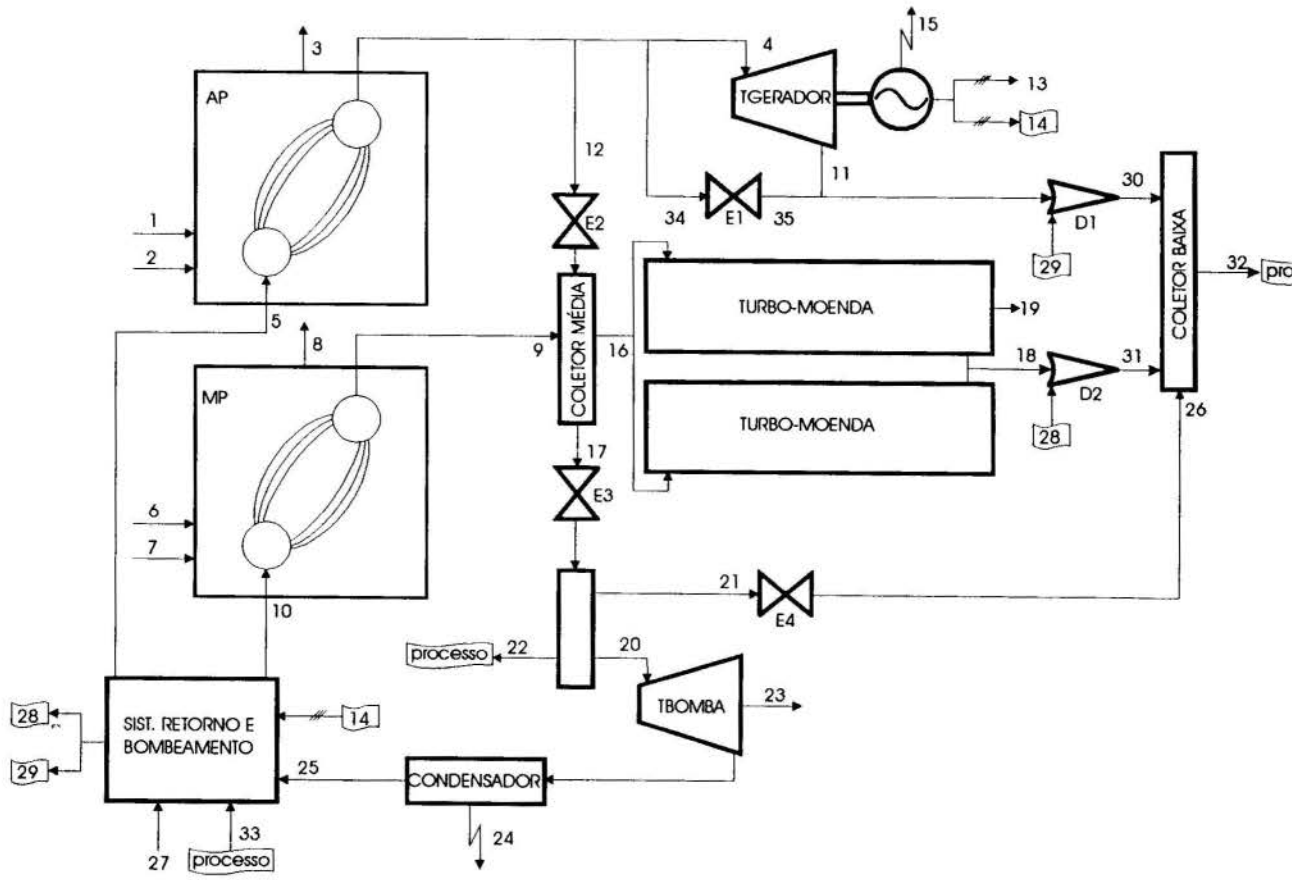


Figura 1 - Esquema simplificado da instalação

AVALIAÇÃO TERMOECONÔMICA

A metodologia de análise desenvolvida por Valero e Lozano (1994) requer primeiramente a adequada divisão do sistema em subsistemas e a identificação e determinação dos fluxos exergéticos internos e externos (insumos e produtos do processo).

Na Figura 1 estão representados os subsistemas adotados para o sistema em estudo: (a) Caldeira de alta pressão; (b) Caldeira de média pressão; (c) Turbogerador; (d) Expansor 1; (e) Coletor Média/Expansor 2; (f) Tandem; (g) Expansor 3; (h) Turbobomba/Condensador; (i) Expansor 4; (j) Desuperaquecedor 1; (k) Desuperaquecedor 2; (l) Misturador final e (m) Sistema de retorno e bombeamento. Na Tabela 1 são apresentadas as vazões mássicas e as propriedades termodinâmicas dos fluxos da instalação (Barreda, 1994, Llagostera, 1994).

O segundo passo consiste na construção de um sistema de equações lineares, representados pela matriz M e pelo vetor Y utilizado para cálculo dos custos exergéticos e financeiros (vetor C). A matriz M é formada por 3 submatrizes: incidência, entradas e saídas e bifurcações. A cada submatriz corresponde um subvetor do vetor Y.

$$\begin{bmatrix} & & \\ & M & \\ & & \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \\ C \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \\ Y \\ \\ \end{bmatrix}$$

As equações de balanço, aplicadas a cada subsistema, constituem a matriz de incidência. Esta tem um número de linhas igual ao número de subsistemas e número de colunas correspondente ao número de fluxos. Os elementos dessa matriz recebem o valor 1 se o fluxo entra no subsistema, -1 se o fluxo sai, e 0 se não guarda relação com o subsistema. O subvetor Y é um vetor nulo, no caso da determinação dos custos exergéticos. Na avaliação de custos monetários, em cada componente do subvetor Y, correspondente à matriz de incidência, serão somados os custos de instalação e manutenção de cada equipamento da planta. A metodologia permite também avaliações parciais: (i) considerar apenas os custos de instalação, (ii) considerar apenas os custos de manutenção, (iii) considerar apenas o impacto da instalação de um equipamento novo em um dos subsistemas — neste caso somente o componente correspondente do subvetor terá um valor diferente de zero. Na análise termoeconômica, assim como no caso (ii) da análise econômica, a linha correspondente à caldeira de alta pressão representa a seguinte equação:

$$C_1 + C_2 + C_5 - C_3 - C_4 - C_{12} - C_{34} = 0$$

Através da matriz de entradas e saídas (e do subvetor Y correspondente), é feita a atribuição de custos (exergéticos ou monetários) aos insumos do sistema, e aos fluxos de saída considerados perdas, aos quais é atribuído um "custo" nulo. Os custos econômicos dos insumos são os utilizados no mercado. Não havendo informação mais detalhada, o custo exergético é considerado igual ao conteúdo exergético do fluxo. Na instalação

Tabela 1 - Vazões e propriedades termodinâmicas dos principais fluxos da instalação

Fluxo	P (MPa)	t (°C)	Vazão (kg/s)	Fluxo Energético (kW)	Fluxo Exergético (kW)
1 Bagaço (CAP)			16,6	126729	165758
2 Ar (CAP)			72,3	0	0
3 Gases (CAP)			88,9	0	0
4 Vapor Alimentação - TG	2,800	400	30,4	98117	35392
5 Água Alimentação (CAP)	2,800	109	37,5	17214	1675
6 Bagaço (CMP)			9,1	69714	91185
7 Ar (CMP)			39,8	0	0
8 Gases (CMP)			48,9	0	0
9 Vapor Alimentação (CM)	1,800	320	20,0	61367	20403
10 Água Alimentação (CMP)	1,800	109	20,0	9081	854
11 Vapor Descarga - TG	0,275	192	30,4	86286	20334
12 Vapor Expansor 2	2,800	398	6,4	20592	7428
13 Potência TG - Externa			0,0	11647	11647
14 Potência TG - Bomba			0,0	184	184
15 Calor Perdido - TG			0,0	0	0
16 Vapor Alimentação - TM	1,800	334	20,2	62742	20995
17 Vapor Alimentação - E3	1,800	334	6,2	19217	6430
18 Vapor Descarga TM	0,275	213	20,2	58440	13918
19 Potência - TM			0,0	4302	4302
20 Vapor Alimentação -TB	1,140	328	3,4	10698	3365
21 Vapor Alimentação - E4	1,140	328	0,7	2304	725
22 Vapor Processo 2	1,140	328	2,0	6215	1955
23 Potência - TB			0,0	565	565
24 Calor Rejeitado - Cond.			0,0	8243	0
25 Água Recirculação	0,275	130	3,4	1890	221
26 Vapor Extração - E4	0,275	318	0,7	2304	581
27 Água Reposição	0,200	30	4,8	601	1
28 Água Desuperaquecedor 2	0,275	105	1,5	678	59
29 Água Desuperaquecedor 1	0,275	105	1,8	779	68
30 Vapor Descarga D1	0,275	130	32,9	89487	20720
31 Vapor Descarga D2	0,275	130	21,7	59118	13689
32 Vapor Processo	0,275	132	55,4	150910	34990
33 Água Retorno Processo	0,200	105	52,6	23154	2021
34 Vapor Expansor 1	2,800	400	0,8	2423	874
35 Vapor Descarga E1	0,275	378	0,8	2423	636

em estudo, são consideradas entradas os fluxos de ar e combustível para as caldeiras e a água de reposição. São saídas sem valor, além dos gases de escape das caldeiras, o calor perdido no gerador elétrico e no condensador. Ainda tomando como exemplo a caldeira de alta pressão, as linhas correspondentes à entrada de ar e bagaço e à saída dos gases representam as seguintes equações:

Entrada de Bagaço $C_1 = E_1$

Entrada de Ar $C_2 = 0$

Saída dos Gases $C_3 = 0$

Finalmente, a matriz das decisões é composta por um número de equações, definidas a partir de considerações econômicas e termodinâmicas, suficiente para que o sistema se torne solúvel univocamente.

À razão entre o custo (exergético ou econômico) e o conteúdo exergético de um determinado fluxo denomina-se *custo unitário*.

$$K = \frac{C}{E_x}$$

Valero e Lozano (1994) propõem um conjunto de regras, baseadas exclusivamente em relações termodinâmicas, para a determinação das equações de bifurcação. A forma com que estes autores consideram a distribuição de custos em um sistema de cogeração correspondem, essencialmente, ao que Gaggioli (1983) denomina *método da extração*. Nesse método, cada subsistema tem um único objetivo, por exemplo no caso de uma turbina a vapor, gerar potência. Neste caso, os custos unitários do vapor de alta e de baixa pressão são igualados. Assim, ao fluxo que constitui o objetivo do subsistema, são imputados todos os custos de instalação e operação desse subsistema.

Considerando que os critérios de atribuição de custos extrapolam os limites da termodinâmica, sendo em verdade econômicos, Gaggioli (1983) e Reistad e Gaggioli (1980) propõe um segundo método: o *das igualdades*. Ainda considerando o exemplo da turbina a vapor, os custos unitários da potência e do vapor de baixa são igualados, repartindo assim os custos entre ambos.

No método da igualdade são definidos os conceitos de "insumo", "produto" e "perda", sendo o produto tudo aquilo que sai do volume de controle e não é perda. No método das extrações são definidos os conceitos de "fuel", "produto" e

"perda", sendo o produto associado somente com a finalidade daquele volume de controle.

Dois cenários são considerados a seguir: o cenário 1 correspondente à avaliação utilizando o *método das igualdades* e o cenário 2 utilizando o *método das extrações*, seguindo a formulação proposta por Valero *et al.* (1994).

Além dos subsistemas ilustrados na figura 1, nos dois cenários é considerado um subsistema a parte, correspondente ao consumo de vapor no processo. No primeiro cenário, são igualados os custos unitários da água de retorno do processo (fluxo 33) e do calor cedido. No segundo cenário, os custos da água de retorno (fluxo 33) e do vapor de processo (fluxo32). Considerando a troca de calor entre o vapor e o caldo de cana internamente reversível, resultam equivalentes as duas proposições. A equação resultante é utilizada em ambos cenários

$$K_{32} = K_{33}$$

As seguintes equações correspondem a divisões de fluxos com os mesmos parâmetros termodinâmicos, sendo comuns a ambos cenários.

Equação	Bifurcação
$K_4 = K_{12}$	vapor na saída da Caldeira de alta pressão (a)
$K_4 = K_{34}$	vapor na saída da Caldeira de alta pressão (a)
$K_{13} = K_{14}$	potência elétrica gerada no Turbogerador (c)
$K_{16} = K_{17}$	vapor na saída do Expansor/Misturador (d)
$K_{20} = K_{21}$	vapor na saída do Expansor 3 (i)
$K_{20} = K_{22}$	vapor na saída do Expansor 3 (i)
$K_{28} = K_{29}$	fluxo de água para os atemperadores

Cenário 1: corresponde à utilização do método das igualdades. As seguintes equações, utilizadas neste cenário, refletem a consideração de que cada subsistema tem mais de uma função, ou seja, mais de um produto. Assim, considera-se que o custo unitário dos dois fluxos-produto é igual.

Equação	Subsistema
$K_{11} = K_{13}$	Turbogerador-Misturador
$K_{18} = K_{19}$	Moendas
$K_{23} = K_{25}$	Turbobomba-Condensador
$K_5 = K_{10}$	Retorno e Bombeamento
$K_{28} = K_5$	Retorno e Bombeamento

Cenário 2 corresponde ao método das extrações (produto

Tabela 2 - Custos exergéticos unitários (Cenários 1 e 2).

	Custo Exergético Unitário		Custo Monetário (US$/MWh)	
Fluxo	**Cenário 1**	**Cenário 2**	**Cenário 1**	**Cenário 2**
1 Bagaço (C1)	1,00	1,00	1,44	1,44
2 Ar (C1)	–	–	–	–
3 Gases (C1)	–	–	–	–
4 Vapor Alimentação - TG	4,01	3,94	5,83	5,67
5 Água Alimentação (C1)	5,77	3,94	9,67	5,67
6 Bagaço (C2)	1,00	1,00	1,44	1,44
7 Ar (C2)	–	–	–	–
8 Gases (C2)	–	–	–	–
9 Vapor Alimentação - M1	4,71	4,66	6,83	6,71
10 Água Alimentação (C2)	5,77	4,66	9,67	6,71
11 Vapor Descarga - TG	4,42	3,94	6,41	5,67
12 Vapor Expansor	4,01	3,94	5,83	5,67
13 Potência TG - Externa	**4,42**	**5,02**	**6,41**	**7,22**
14 Potência TG - Bomba	4,42	5,02	6,41	7,22
15 Calor Perdido - TG	–	–	–	–
16 Vapor Alimentação - TM	4,59	4,54	6,66	6,53
17 Vapor Alimentação - E3	4,59	4,54	6,66	6,53
18 Vapor Descarga TM	5,29	4,54	7,68	6,53
19 Potência - TM	**5,29**	**7,47**	**7,68**	**10,74**
20 Vapor Alimentação - TB	4,89	4,83	7,09	6,94
21 Vapor Alimentação - E4	4,89	4,83	7,09	6,94
22 Vapor Processo 2	**4,89**	**4,83**	**7,09**	**6,94**
23 Potência - TB	**20,91**	**26,87**	**30,33**	**38,64**
24 Calor Rejeitado - COND	–	–	–	–
25 Água Recirculação	20,91	4,83	30,33	6,94
26 Vapor Extração E4	6,09	6,02	8,83	8,66
27 Água Reposição	1,00	1,00	2612,97	2612,97
28 Água Atemperador 2	5,77	11,52	9,67	45,43
29 Água Atemperador 1	5,77	11,52	9,67	45,43
30 Vapor Descarga Atemp1	4,52	4,08	6,57	5,96
31 Vapor Descarga Atemp2	5,40	4,66	7,85	6,83
32 Vapor Processo	**4,89**	**4,34**	**7,11**	**6,34**
33 Água Retorno Processo	4,89	4,98	7,11	7,29
34 Vapor Alimentação E1	4,01	3,94	5,83	5,67
35 Vapor Descarga E1	5,52	5,42	8,01	7,80

único em cada subsistema). A matriz das decisões foi formada pelas equações, resultantes da consideração de custo unitário igual para as correntes de "fuel" e de "produto", que entram e saem do subsistema.

Equação	Subsistema
$K_{11} = K_4$	Turbogerador (Fuel)
$K_{18} = K_{16}$	Moendas (Fuel)
$K_{20} = K_{25}$	Turbobomba -Condensador (Fuel)
$K_9 = K_{10}$	Caldeira de meia pressão (Produto)
$K_4 = K_5$	Caldeira de alta pressão (Produto)

A Tabela 3, apresentada a seguir, resume, para todos os subsistemas, "fuel", produto e perda (identificados com os números do fluxo correspondente à figura 1), segundo o procedimento utilizado no Cenário 2.

Tabela 3 - "Fuel" (F), produto (P) e perda (L) em cada subsistema (Cenário 2).

Subsistema	F	P	L
Caldeira AP	1, 2	(4 + 12 + 34 - 5)	3
Caldeira MP	6, 7	(9 - 10)	8
Turbogerador	(4 - 11)	13, 14	15
Expansor 1	34	35	-
Exp. 2/Coletor Média	9, 12	16 , 17	-
Tandem	16	18 , 19	-
Expansor 3	17	(20 + 21 + 22)	-
Turbobomba/Cond.	(20 - 25)	23	24
Expansor 4	21	26	-
Desuperaquecedor 1	11, 29	30	-
Desuperaquecedor 2	18, 28	31	-
Coletor de Baixa	30, 31, 26	32	-
Sist. de bombeamento	14	(28+29+5+10-25-27-33)	-

O vetor $C=M^{-1}Y$ é então calculado para ambos cenários. Os custos exergéticos e monetários obtidos segundo cada método são apresentados na Tabela 2.

RESULTADOS

Na primeiras colunas da Tabela 2 constam os fluxos externos e internos do sistema. Na segunda e terceira colunas são reportados os custos exergéticos unitários desses fluxos, segundo cada proposição de divisão de custos, sendo que aqueles que têm valor unitário são os fluxos externos. Na quarta e quinta coluna são apresentados os custos monetários. Na determinação desses últimos, foram considerados apenas os custos do bagaço (US$4,00/t) e da água de reposição (US$0,20/t).

Como pode ser observado, os resultados obtidos têm relação direta com o método de distribuição de custos adotado. Os custos atribuídos aos produtos do sistema (vapor de processo, potência elétrica, potência mecânica nos tandens e na turbobomba) variam significativamente entre os dois cenários. No Cenário 1 (*método da igualdade*) o custo exergético unitário da potência gerada é menor que no Cenário 2 (*método das extrações*), que só reconhece, como produto da turbina, a potência gerada. Dessa forma, sobre ela recaem todos os custos associados ao funcionamento da turbina enquanto no primeiro caso tanto vapor de exaustão quanto potência são reconhecidos como produto, sendo os custos repartidos entre ambos. Como conseqüência do mesmo procedimento, o custo da água de condensação, proveniente da turbobomba, é maior no Cenário 1 que no Cenário 2.

Ainda em relação à produção de potência, é evidente, em ambos cenários, o custo quatro vezes maior da potência produzida pelas turbobombas. Isto pode ser atribuído em parte ao já elevado custo do vapor utilizado: observe-se que o custo do vapor que alimenta a turbobomba (fluxo 20) foi aumentado na sua passagem através dos expansores 2 e 3. Além disto a exergia destruída no condensador implica, em especial no segundo cenário, em substancial acréscimo de custos.

O custo do vapor fornecido ao processo à pressão de 1,14 MPa (fluxo 22) é pouco menor que o do vapor fornecido à pressão de 0,275 Mpa (fluxo 32), no cenário 1, e maior no cenário 2. Esta diferença deve-se novamente ao processo de produção dos dois fluxos. Enquanto o primeiro é produzido pela expansão de vapor através de uma válvula, o segundo é majoritariamente composto por vapor expandido em turbinas.

O custo unitário do vapor fornecido ao processo é composto pelos custos do vapor de descarga do turbogerador e dos tandens, da água utilizada nos desuperaquecedores e do vapor extraído através do expansor 4. Observa-se, nos dois cenários, que esse custo é maior que o custo do vapor de descarga do turbogerador e menor que todas as demais parcelas. O custo do vapor de descarga dos tandens é influenciado pelo maior custo unitário de produção do vapor de média pressão, como conseqüência da menor eficiência do gerador de vapor, e pelo uso de vapor de alta pressão, através do expansor 2.

O custo da água de desuperaquecimento é influenciado pelo custo da água de recirculação, no primeiro cenário, e pelo reduzido custo da água fornecida às caldeiras, no segundo. Em ambos cenários, a passagem de vapor através do expansor 4 representa fator de elevação do custo do vapor de processo. Tendo em vista a expansão de vapor de alta pressão através dos expansores 2 e 3, em vazões superiores às do expansor 4, o vapor fornecido por este ao processo pode ser entendido como vapor de alta pressão expandido através de processos altamente irreversíveis — de elevado custo, portanto.

CONCLUSÕES.

Os resultados obtidos neste trabalho comprovam a validade do emprego da análise termoeconômica de processos na atribuição de custos a diferentes produtos de processos industriais. A observação dos custos internos ao processo permitem ainda a identificação dos equipamentos causadores das principais elevações de custo.

Verificou-se a importância da escolha cuidadosa do critério de alocação de custos a ser utilizado. Tal escolha deve ser norteada pela objetivo principal da análise efetuada — no caso estudado, se o aumento da produção de energia elétrica ou do vapor de processo.

BIBLIOGRAFIA

Barreda, E. R. e Llagostera, J. I., 1996, "Avaliação das Possibilidades de Incremento da Cogeração em Usinas Açucareiras Cubanas", *Anais do VI ENCIT - Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência Térmicas*, Florianópolis, SC.

Barreda, E. R., 1994, "Avaliação das Possibilidades de Incremento da Cogeração em Usinas Açucareiras Cubanas", Dissertação de Mestrado, UNICAMP, Campinas, SP.

Gaggioli, R. A., 1983, "Second Law Analysis for Process and Energy Engineering," *ACS Symposium Series 235*, pp. 3-50.

Llagostera, J. I., 1994, "Subrotinas de Computacionais de Elevada Exatidão para Determinação de Propriedades Termodinâmicas da Água", Anais do IV ENCIT - Encontro Nacional de Ciências Térmicas, São Paulo, SP.

Nebra, S. A, 1995, Notas de Aulas de Termoeconomia, UNICAMP.

Reistad, G. M., Gaggioli, R. A., 1980, "Avaiable-Energy Costing," *ACS Symposium Series 122*, pp. 143-160.

Valero, A., Lozano, M. A. , 1994, Curso de Termoeconomia, UNICAMP.

Vertiola, S. R., Oliveira Jr, S., 1995, Anais do ECOS'95, Istambul, Turquia, pp. 231-236.

Walter, A. C, Llagostera, J. I., 1995, Anais do *Cogen-Turbo Power Conference*, Vienna, Austria (ASME 95-CTP-14).

SUMMARY

Cogeneration is usual practice in sugar-cane mills. In this work, thermoeconomic analysis is applied to a tipical cuban sugar-cane mill. Two different cost attribution methods, the *extraction method* and the *equality method* are used to evaluate the exergetic and monetary (operational) costs of each flux within the system, especially the steam and generated power. The methodology indicates the equipments responsible for the greatest irreversibilities in the system.

AVALIAÇÃO DO POTENCIAL DO USO DE RESÍDUOS INDUSTRIAIS NA PRÁTICA DE COGERAÇÃO

Emerson Bravo Stocco
José Antonio Perrella Balestieri
Câmpus de Guaratinguetá
UNESP - Universidade Estadual Paulista
12500-000 - Guaratinguetá - SP - Brasil

RESUMO

Neste trabalho procura-se demonstrar que há viabilidade técnica e econômica no aproveitamento de resíduos industriais. São identificadas fontes potenciais de aproveitamento de energia a partir de resíduos industriais, dentre eles produtos gasosos da exaustão de motores, de turbinas a gás, de processo de fundição ou sólidos, como bagaço de cana, borra de café e fibras. Identificam-se máquinas térmicas ou ciclos que comportam a conversão dessas fontes em energia térmica e/ou elétrica.

INTRODUÇÃO

A década de 1990 vem apresentando sinais positivos para o setor elétrico nacional; um processo paulatino de recuperação das tarifas vem sendo buscado, ainda que por vezes tenha sucumbido às manobras de controle da inflação; uma abertura gradual do mercado gerador ao investidor privado tem sido aventada, inicialmente de forma um tanto tímida, mas que promete se ampliar à medida que o mercado responder positivamente aos esforços governamentais para o desenvolvimento do país e à abertura da economia aos novos mercados (Balestieri, 1995).

Esse esperado crescimento da economia virá acompanhado, certamente, de uma maior demanda de energia tanto em nível industrial quanto nos setores residencial/comercial/serviços. Assim sendo, a cogeração é hoje a forma mais eficaz de se posicionar os novos investimentos em geração elétrica por representar, de início, a possibilidade de uma efetiva participação da iniciativa privada na geração e venda de excedentes de energia elétrica, assim como pelos elevados níveis de eficiência obtidos na geração conjugada (calor e eletricidade), pelo aumento da confiabilidade do fornecimento de energia tanto às plantas industriais quanto ao sistema elétrico, beneficiário da geração de excedentes, assim como pela redução das emissões de poluentes evidenciada com a implantação dessa tecnologia.

O sempre presente risco de aumento dos preços dos combustíveis e as recentes projeções de demanda mundial de energia tem levado a uma maior atenção para o calor perdido ou fonte residuais que poderiam ser aproveitadas. Resíduos industrias que são propostos como combustíveis podem ser aproveitados por serem quentes, ou combustíveis, ou ambos. Exemplos de resíduos usados por seu calor sensível são os gases de exaustão da turbina a gás, onde é comum o uso do calor dos gases em caldeiras formando parte da energia total das mesmas.

Uma grande variedade de resíduos sólidos são usados para produção de vapor; tais resíduos podem ter altos valores caloríficos mas tendem a se tornar volumosos e por isso, em muitos casos, são queimados *in loco*. O uso de resíduos como combustível não deve vir a ser a atividade principal da indústria que o estiver gerando, a não ser que esta tenha sido construída para tal fim. Muitos resíduos industriais contém substâncias tóxicas ou poluentes; alguns podem conter materiais recuperáveis, como o enxofre em alguns gases aromáticos, que podem ter valores de mercado.

Nesse trabalho pretende-se identificar os resíduos industriais que são fontes potenciais de energia, bem como a forma de viabilizar seu aproveitamento.

COGERAÇÃO

Define-se cogeração como sendo a geração simultânea de energias térmica e eletromecânica a partir do consumo de uma mesma fonte de combustível. É uma forma racional de aproveitamento de energia primária . Nesta concepção, tanto a eletricidade como o calor são produtos principais e complementares (Silveira, 1990).

As tecnologias de cogeração são usualmente classificadas em dois grupos, de acordo com a ordem relativa de geração de potência e calor, do ponto do fluxo energético. Tem-se , assim, os ciclos *bottoming* e os ciclos *topping*.

Os sistemas que operam segundo os ciclos *bottoming* se baseiam na recuperação do calor rejeitado à altas temperaturas por processos industriais, que é utilizado para a geração de vapor. Já no caso dos sistemas que operam segundo os ciclos *topping*, fluxos de calor a uma temperatura mais elevada são utilizados na geração de eletricidade; a energia residual deste processo é que é destinada à geração térmica, usualmente na forma de calor.

Os principais ciclos utilizados para configurações de centrais de cogeração são:

* ciclo a vapor (Rankine);
* ciclo a gás (Brayton);
* ciclo combinado;
* ciclo Diesel.

São apresentadas na Tabela 1 características gerais, de ordem técnica e econômica, dos principais ciclos empregados em projetos de centrais de cogeração.

RESÍDUOS INDUSTRIAIS

O controle dos resíduos sólidos doméstico, municipal e industrial tem-se tornado um sério problema devido principalmente:

a) ao crescimento populacional e ao aumento do padrão de vida, os quais têm contribuído para um aumento na taxa de produção de resíduos;

b) a uma escassez da disponibilidade de local apropriado para abrigá-los.

TABELA 1 - Características gerais de alguns ciclos utilizados na cogeração

ciclo e combustível	consumo espec. de calor	custo de investimento	custo do combustível	custo O&M fixo	custo O&M variável
	kJ/kWh	US$/kW	US$/GJ	US$/kWano	US$/MWh
Rankine (Carvão)	10550 10097	5/20MW:3000-1800 20/40MW:1800-1400 40/+MW:1200	1.61 1.42	16.0 28.1	4.0 2.7
Rankine (Gás Natural)	10022	5/20MW:1800-1000 20/40MW:1000-800 40/+MW:800	2.37	2.0	2.0
Brayton (Gás Natural)	12027 12132	1/5MW:500-390 5/25 MW:430-360 25/60 MW:370-260 60/+ MW:210-180	2.37 2.51	1.0 0.7	1.0 7.3
Combinado (Gás Natural)	8176 7543	2/10 MW:1200-1000 10/60 MW:1000-800 150/+ MW:550-650	2.37 2.51	5.0 3.7	2.0 3.3
IGCC (Carvão)	9442	1700	1.42	38.8	3.7

Nota: IGCC - ciclo combinado com gaseificação integrada

Fontes: (a) Gas Turbine World, 1988; (b) Power Engineering ,1991; (c) Gas Turbine World Handbook, 1991;(d) Cogeneration, 1986.

O controle dos resíduos pode ser muito dispendioso, particularmente quando este existe em grandes quantidades e são transportados para áreas que distam do ponto de foram coletados em até 80 km; por isso, a incineração dos resíduos tem sido uma boa alternativa, pois:

a) pode geralmente ser levado para lugares mais próximos dos pontos de coleta;

b) a queima produz um material que tem propriedades orgânicas que podem ser utilizados na agricultura;

c) pode ser usado como fonte energética barata para produzir:

- vapor para geração de eletricidade;
- água quente;
- ambos (a partir da cogeração);

d) também pode ser considerado combustível, com valores calorificos da ordem de 8160 kJ/kg, conforme o resíduo.

O recolhimento de resíduos sólidos da indústria para o incinerador pode ser feito por transporte rodoviário ou ferroviário, em carros especialmente projetados para tal função. Um grupo de resíduos usados como combustível é o refugo do processo de matéria vegetal; provavelmente o mais comum desse material é o bagaço de cana, mas outros resíduos tem sido tentativamente usados, como borra de café, fibras diversas, resíduos de semente de algodão, cascas de arroz, etc.

As propriedades de alguns desses combustíveis são dadas na Tabela 2; muitos dos materiais são queimados como forma de se desfazer dos mesmos e nem sempre visando contribuir para o atendimento da demanda energética da indústria; alguns, como o bagaço, fornecem a maior parte da energia requerida pela indústria.

A indústria de aço produz grande quantidade de resíduos gasosos; também a indústria metalúrgica produz em grande quantidade resíduos gasosos quentes, que em muitos casos tem que ser resfriado para distribuição e, portanto, são convenientes fontes energéticas. As propriedades energéticas de alguns resíduos são dados na Tabela 3.

TECNOLOGIAS DE COGERAÇÃO PARA QUEIMA DE RESÍDUOS

Dentre as tecnologias disponíveis para a prática da cogeração, alguns ciclos ou máquinas comportam a conversão da energia presente nos resíduos em energia térmica ou elétrica para uso em processo:

Motores Diesel. São aplicados em ciclos *topping* de sistema de cogeração quando uma alta taxa de saída de potência elétrica para o processo é requerida, acima de 400 kW por $1.06x10^6$ kJ de calor entregue ao processo. Vapor de processo e água quente são produzidos em caldeiras de recuperação acoplados à exaustão do motor e para a refrigeração do motor.

TABELA 2 - Combustíveis sólidos

materiais	% dos materiais (sem tratamento)					
	combustíveis		inertes		poder calorífico(10^3 kJ/kg)	
	mat. voláteis	%carbono	cinza	umidade	Superior	inferior
antracita de má qualidade	5.40	77.26	5.64	11.70	6.18	5.99
escória	20.31	33.58	31.01	15.10	3.70	3.58
bagaço de cana	29.62	6.84	0.24	53.30	1.84	1.43
borra de café	76.47	11.88	0.66	10.99	3.44	3.16
fibra e casca de algodão	63.96	18.16	1.92	15.96	3.13	2.79
casca e fibra de palmeira	55.11	13.63	0.87	30.39	2.92	2.61

Fonte: Burnett, 1979

TABELA 3 - Energia e densidade de resíduos indúsriais

resíduo	poder calorífico (kJ/kg)	densidade (kg/m^3)
betume	7967.1	889.9
papelão	3274.3	106.7
cortiça	5452.4	189.8
sabugo de milho	3846.5	177.9
capim	989.5	44.4
látex	4808.1	711.9
revista	2524.3	501.3
nylon	6548.7	118.6
parafina	8953.2	830.5

Fonte: Gyftopoulos, 1982

Sistemas pequenos de 100 kW até milhares de quilowatts podem ser construídos. Entretanto, estes sistemas tomam por base as velocidades média e alta do motor Diesel.

Um motor Diesel mais versátil para sistemas de cogeração *topping* até 30.000 kW, é maior para baixas velocidades em motores de dois cilindros. Esse tipo de motor, freqüentemente usado para propulsão de grandes barcos, é capaz de queimar combustível de baixa qualidade, tal como óleo crú com alto teor de enxofre ou resíduos pesados de óleo. Recentes experimentos têm mostrados que o motor Diesel pode ser capaz de queimar o pó de carvão resultante de seu processo de lavagem. O custo do sistema incluindo as caldeiras de recuperação varia de 1.200 a 1.800 US$/kW. Um sistema de cogeração *topping* baseado em unidadde Diesel é mostrado na figura 1.

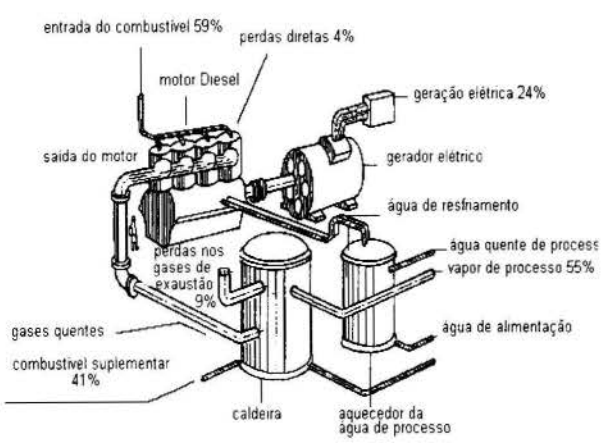


FIGURA 1- Unidade *toppping* com motor Diesel

Trocadores de calor recuperam uma porção da energia perdida que normalmente seria desperdiçada na geração de eletricidade. Os gases de exaustão são usados para preaquecer o ar de combustão da caldeira de queima suplementar, que produz vapor a 1,55 MPa. Do poder calorífico total do combustível, o sistema utiliza 87%, 24% como eletricidade, 55% como vapor e 8% como água quente.

Resíduos energéticos recuperados substituem 450 barris de óleo por dia que teriam sido consumidos em processo convencionais; o custo é de 25 milhões de dólares e o tempo de retorno (*payback*) em torno de 3 anos.

Turbinas a Gás. Os gases de exaustão da turbina a gás são muito mais quentes que os gases do motor Diesel; as turbinas a gás podem ser utilizadas em configurações com maior capacidade de geração que o motor Diesel.

Quando há interesse em recuperar os gases da turbina a gás, esse arranjo é chamado de ciclo combinado e vários outros arranjos são possíveis. Primeiro, o calor é simplesmente extraído dos gases e os gases frios são eliminados para a atmosfera. De uma turbina a gás de 75 MW, 25 a 30 MW são obtidos do vapor produzido pelo calor residual e o arranjo usual consiste em dispor várias turbinas a gás suprindo vapor para uma mesma turbina a vapor. Este é o mais eficiente arranjo do ponto de vista elétrico (figura 2).

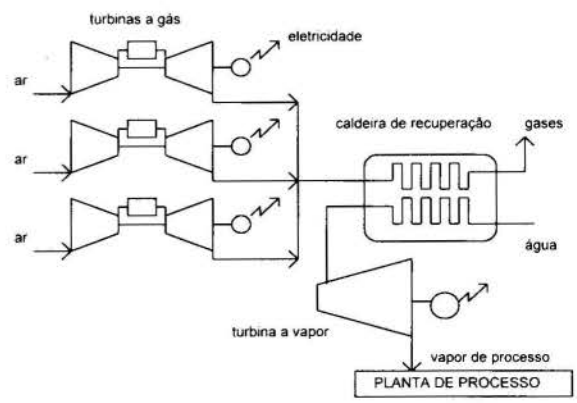


FIGURA 2- Ciclo combinado

TABELA 4 - Condições técnicas de alguns resíduos gasosos

Material	Temperatura (°C)
exaustão do motor Diesel	400
exaustão da turbina a gás	500
gases da fundição do cobre	800
gás recuperado em fornalha	1000

Material	poder calorífico (MJ/m^3)
gases do alto forno	3.4
gases do coque	18.5
gás drenado de mina de carvão	30.0
gás recuperado em mina de carvão	0.4

Fonte: Burnett, 1979

As turbinas a gás funcionam com maior excesso de ar do que as caldeiras, logo é possível queimar mais combustível nos gases de exaustão, aumentando sua temperatura e incrementando o trabalho disponível. Uma proposta de interligar uma turbina a gás de 75 MW com uma turbina a vapor de 75 MW teria eficiência reduzida, mas o incremento do custo deste esquema seria baixo e poderia ser econômico, particularmente quando se considera que o resíduo combustível seria queimado de qualquer modo.

Um terceiro arranjo seria queimar combustível nos gases de exaustão para aumentar seu CO_2 para o nível usado em outras caldeiras. Neste arranjo, a saída disponível da turbina a vapor deve ser muito maior do que o da turbina a gás.

Sistemas de turbinas a gás oferecem baixo custo de investimento, da ordem de 500 a 1.000 US$/kW, particularmente em sistema na faixa entre 10.000 e 150.000 kW. Ainda, a alta temperatura dos gases de exaustão da turbina a gás permite sua integração com uma grande variedade de processos industriais.

Hidrólise do refugo. Recentemente foi desenvolvido um processo para hidrólise do refugo de celulose. A principal alegação é que o tempo para completar a hidrólise é de 1 a 2 minutos em vez de 3 horas e meia, mas com o mesmo rendimento por tonelada e o custo do investimento é reduzido por um fator de 200.

Para a entrada de refugo de 250 toneladas por dia, contém 40% de papel, o rendimento calculado de etanol do processo é de 22.4 toneladas por dia. O poder calorífico do etanol por unidade de massa é de cerca de 2700MJ/kg .

A QUESTÃO ECONÔMICA

A variável custo é importante não apenas por que irá definir a rentabilidade de um empreendimento mas também porque pode representar a decisão por uma configuração de central de cogeração totalmente diversa da proposta com base nos valores correntes de preços dos combustíveis e tarifas de venda de energia elétrica.

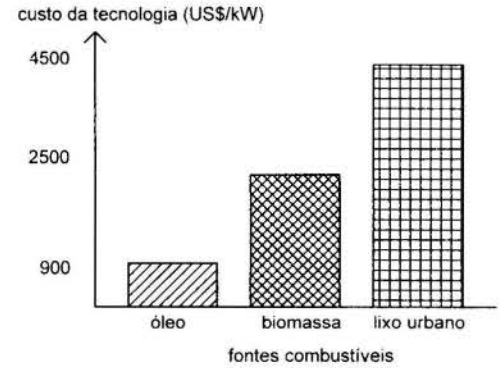
Suponha-se que um projeto seja proposto admitindo o atual preço do gás natural; no caso de se concretizar o acordo com a Bolívia para a compra desta fonte combustível, considerando-se que haja uma diminuição do seu preço pelo aumento da oferta do produto, é possível que a configuração original se torne pouco satisfatória face à realidade do novo cenário.

Além disso, a avaliação das fontes combustíveis possíveis de serem empregadas (incluindo-se os resíduos industriais, comuns em alguns setores) permite decisões mais favoráveis para o projeto assim como faculta a possibilidade de se empregar sistemas duais (mais de uma fonte combustível) nos equipamentos de geação.

No caso de venda de energia elétrica à concessionária e não diretamente ao consumidor, a tarifa a ser praticada deve refletir os custos de geração acrescido das taxas de retorno praticadas pela iniciativa privada de modo a efetivamente incentivar a produção independente.

As flutuações de demandas de energia, analisadas em seu contexto anual, podem ocorrer em decorrência de alterações na linha de produção por imposição do mercado consumidor (obsolescência de produtos, rejeição por pressões ambientais, explosão de vendas por "modismo", etc) ou podem ser impostas por meio de políticas da empresa (por exemplo, orientação de conduta voltad à conservação de energia, previsão de aumento nas importações com consequente aumento na demanda de energia, etc).

O surgimento de novas tecnologias e a rapidez com que têm se tornado comerciais suscitam prudência no planejamento de centrais de cogeração. As oportunidades quase nunca podem ser adiadas à espera de que tecnologias mais avançadas surjam, representando maiores vantagens ao cogerador. Muitas destas tecnologias apresentam no presente um custo diferencial em relação às tecnologias convencionais que não as tornam atrativas (figura 3 e Tabela 5), porém seu paulatino desenvolvimento irá tornando-as mais e mais recomendáveis; assim, mesmo a custos superiores aos atualmente praticados, existe uma oportunidade de geração termoelétrica a partir de resíduos em geral, num futuro próximo.



Nota: ciclo a vapor

FIGURA 3- Custo diferencial em ciclos de cogeração

Tabela 4 - Parâmetros técnico-econômicos de ciclos utilizados em centrais de cogeração

ciclo combustível	investimento (US$/kW)	eficiência total (%)	emissão SO_2 (kg/MWh)	emissão CO_2 (kg/MWh)	emissão NOx (kg/MWh)
vapor/óleo	840-1000	-	0.36	277	0.18
vapor/carvão	1300-1800	-	2.16	330	
vapor/lixo urbano	4500	80	0.14	90	0.36
vapor/biomassa	2100-2600	86	-	-	0.18
gás/gás natural	500-900	87	0.007	198-240	0.18
gás/biom.gaseificada	1700-2000	77-80	-	-	0.18
combinado/gás natural	550-850	85	0.007	198	0.43
Diesel/gás natural	1240	85	0.007	198	3.6

Fonte:Balestieri, 1994

CONCLUSÕES

O crescimento econômico que vem sendo verificado nos últimos anos trouxe também um incremento na demanda elétrica tanto no setor industrial quanto no residencial, comercial e de serviços; como os recursos hídricos além de requererem altos investimentos estão atualmente quase esgotados para o aproveitamento energético, torna-se necessária a busca de novas tecnologias, além de políticas visando a conservação de energia.

Neste sentido, a cogeração aparece como uma importante alternativa técnica e economicamente viável, proporcionando uma melhor racionalidade no aproveitamento de energia primária.

Outro problema a ser enfrentado atualmente é a questão do lixo, tanto urbano quanto industrial. O controle dos resíduos é muito dispendioso, principalmente pela escassez da disponibilidade de local apropriado para abrigá-los.

Procurou-se mostrar nesse trabalho o potencial de utilização de resíduos como fonte energética de baixo custo para a produção de eletricidade e vapor, mostrando suas propriedades energéticas e possíveis ciclos para o aproveitamento de resíduos.

REFERÊNCIAS

Balestieri, J. A. P. Geração conjunta de energia. Guaratinguetá, UNESP, circulação interna, 1995.

Balestieri, J.A.P. Planejamento de centrais de cogeração: uma abordagem multiobjetiva. Campinas, Fac. Eng. Mecânica, (Depto. Energia) UNICAMP, tese (doutorado), 1994.

Burnett, J. M. Waste Materials as Fuels. In: O'Callaghan, P. Energy for Industry. Oxford, Pergamon, 1979.

Cogeneration, v. 3, n. 5, 1986.

Gas Turbine World, v. 18, n. 5, p. 12 - 20, 1988.

Gas Turbine World Handbook, 1991.

Gyftopoulos, E. P., Windmer, T. F. Cost-Effective Waste Energy Utilization. Annual Review of Energy, p. 293-327, 1982.

Power Engineering, v. 95, n. 7, p. 35-39,1991.

Silveira, J. L. Estudo de sistemas de cogeração aplicado a fabricação de papel e celulose. Itajubá, Instituto de Engenharia Mecânica - Escola Federal de Engenharia de Itajubá, dissertação (mestrado), 1990.

ABSTRACT

This article demonstrates that it is technical and economic feasible to recovery the heat from waste. Some possible gaseous wastes are analyzed - as gas turbines and internal combustion engine exhaust gases - or solids ones - as sugar cane biomass and fibers. It is also discussed the thermal machines and cycles that may used to produce thermal and/or electrical energy by fueling these products.

ABCM

ANÁLISE EXERGÉTICA DO PROCESSAMENTO PRIMÁRIO DE PETRÓLEO

Silvio de Oliveira Júnior [(a)] e Marco Van Hombeeck[(b)]
(a) Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo e Escola Politécnica da USP
(b) Centro de Pesquisas da PETROBRAS

RESUMO

Este artigo apresenta a análise exergética dos processos de separação de petróleo que ocorrem em plantas terrestres (onshore) e marítimas (offshore), a fim de caracterizar o desempenho termodinâmico desses processos e identificar possíveis formas de aumentar o rendimento global da planta. Esta análise é empregada na avaliação de desempenho de uma típica instalação terrestre de separação de petróleo, sendo comparadas três condições de operação

INTRODUÇÃO

Em uma planta de processamento primário de petróleo energia é utilizada na forma de calor e trabalho para fins de aquecimento do petróleo, compressão do gás natural e bombeamento do óleo. Nos sistemas de produção offshore e terrestre o insumo energético utilizado é o próprio gás natural produzido na plataforma. O gás natural é queimado em turbinas a gás (plataformas offshore) ou motores a gás (plantas terrestres), e os gases de exaustão das turbinas e motores podem ser recuperados para o aquecimento do petróleo, para facilitar a separação de seus componentes, caracterizando-se assim uma condição de operação típica (do ponto de vista do uso do insumo energético) de uma planta de cogeração. O gás natural também pode ser queimado em fornos para suprir a demanda de carga térmica de aquecimento, de forma complementar, ou não, ao aquecimento provocado pelo uso do rejeito térmico das turbinas e motores a gás.

A Figura 1 mostra uma representação esquemática do uso da energia numa planta de processamento primário baseada na instalação existente numa plataforma offshore. Nela pode-se destacar dois conjuntos de turbinas a gás, um que aciona diretamente compressores de gás e outro que está acoplado a um gerador elétrico, um compressor 'booster' (acionado por motor elétrico), duas bombas (acionadas por motores elétricos), um recuperador de calor e um forno, e um separador. A carga térmica requerida pelo separador é suprida pelos gases de escape das turbinas (linhas pontilhadas que ligam as turbinas ao recuperador de calor) e pelo forno. A Figura 1 mostra também os fluxos de petróleo, enviado ao separador, água (descartada da planta), óleo (enviado para as bombas), e gás (que é parcialmente consumido na planta).

Como na separação de petróleo um de seus componentes (o gás natural) é diretamente empregado como insumo para a operação da planta de processamento primário, processos de conversão de energia ineficientes acarretam um consumo adicional e desnecessário de petróleo, além de, possivelmente, implicar uso de equipamentos com capacidade acima daquela necessária numa instalação eficiente. Este fato destaca a importância do desenvolvimento da análise exergética do processamento primário de petróleo.

ANÁLISE EXERGÉTICA DE UMA PLANTA DE PROCESSAMENTO PRIMÁRIO

Considere-se o esquema da Figura 1, isto é, uma planta de cogeração com aquecimento complementar, onde potência elétrica e mecânica são obtidas através do emprego de turbinas a gás, e aquecimento é providenciado pelo reaproveitamento dos gases de escape das turbinas a gás e complementarmente por um forno. Nela são indicados os fluxos de massa de entrada (petróleo) e saída (água, óleo e gás).

Admitindo-se que a planta opera em regime permanente e que não há trocas de calor com o meio, o balanço de exergia para a planta de processamento primário é dado pela Equação 1.

$$m_p b_p + B_{comb} = m_o b_o + m_g b_g + m_a b_a + B_{dest} \qquad (1)$$

onde b é a exergia específica, m é fluxo de massa, B_{comb} a taxa de exergia fornecida pelo gás combustível e B_{dest} a taxa de destruição de exergia. Os índices o, g, a, p, referem-se, respectivamente, a óleo, gás, água e petróleo.

Define-se exergia global de separação, B_{global}, pela Equação 2.

$$B_{global} = m_o b_o + m_g b_g + m_a b_a - m_p b_p \qquad (2)$$

Explicitando-se a Equação 1 em termos de entalpias (h) e entropias (s) dos fluxos de massa (m) obtém-se, segundo Kotas (1985):

$$B_{comb} = m_o(h_o - T_o s_o) + m_g(h_g - T_o s_g) + m_a(h_a - T_o s_a) - m_p(h_p - T_o s_p) + B_{dest} \qquad (3)$$

onde T_o é a temperatura do meio ambiente.

Com as Equações (2) e (3) é possível realizar a avaliação do desempenho dos processos de separação, compressão e bombeamento existentes numa planta de processamento primário de petróleo. A quantificação do desempenho do processo de separação é feita através do cálculo de seu rendimento exergético, $[\eta_b]_{global}$, (Oliveira (1990) e Tsatsaronis (1995)), definido como:

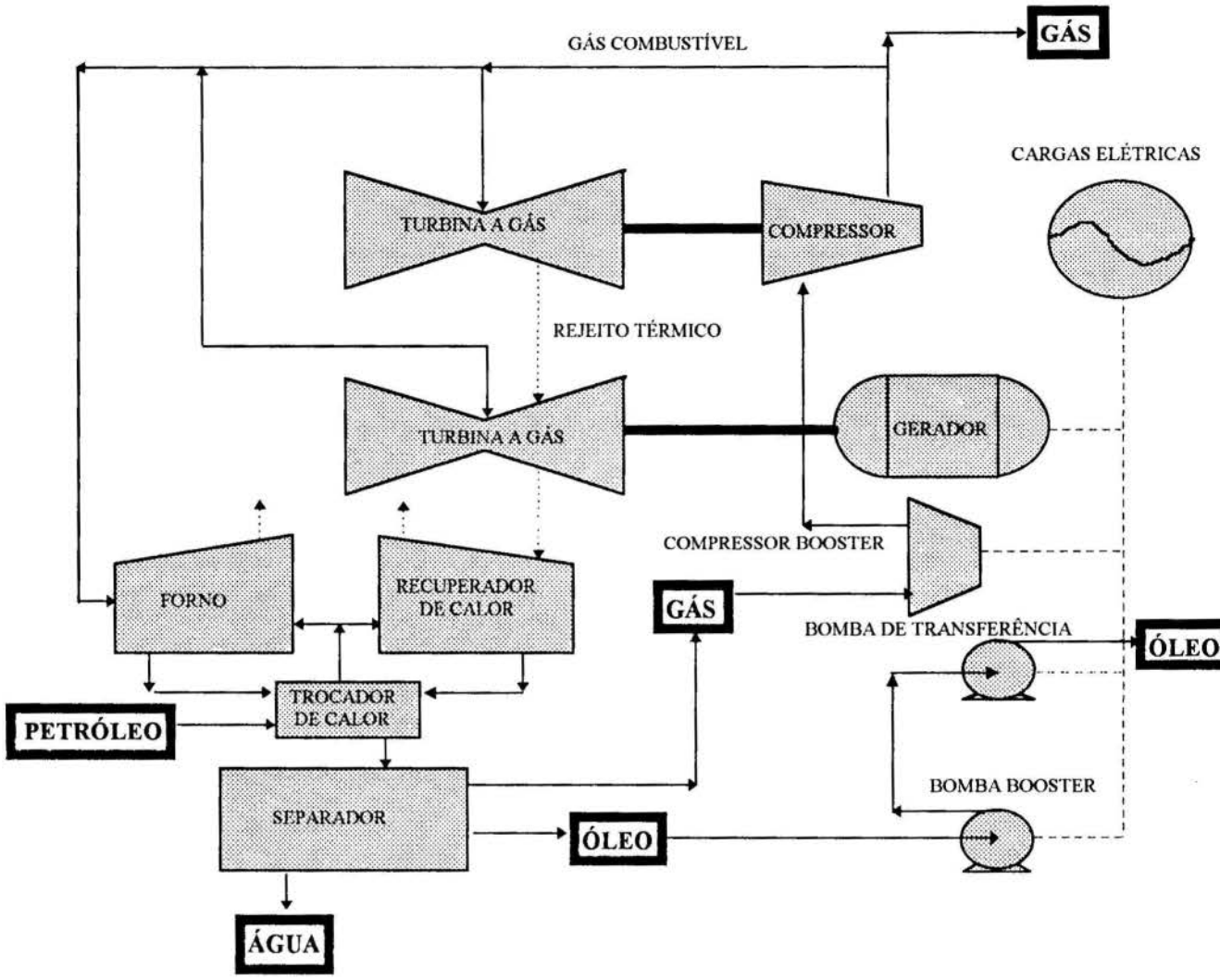
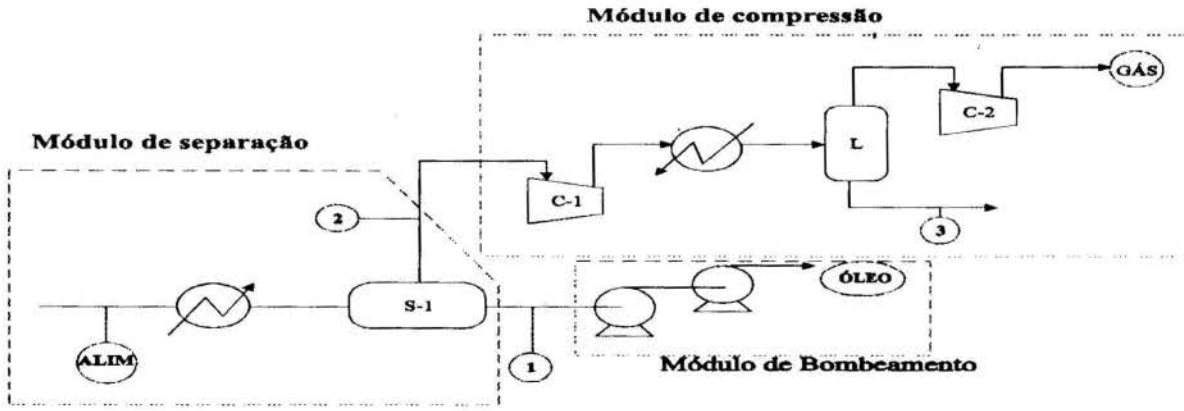


Figura 1 - Representação Esquemática de uma Planta de Processamento Primário de Petróleo.



S - Separador
C - Compressor
L- Separador de Líquido

Figura 2 -Planta de Processamento Primário Analisada.

$$\eta_b = \frac{\text{efeito exergetico util}}{\text{exergia consumida}} \quad (4)$$

Para a planta de separação esquematizada na Figura 1 a expressão de $[\eta_b]_{global}$ fica:

$$[\eta_b]_{global} = \frac{B_{global}}{B_{comb}} =$$

$$\frac{m_o(h_o - T_o s_o) + m_g(h_g - T_o s_g) + m_a(h_a - T_o s_a) - m_p(h_p - T_o s_p)}{B_{comb}} \quad (5)$$

De forma análoga podem ser definidos os rendimentos exergéticos dos principais equipamentos que compõem a planta de separação, ou seja, separador, $[\eta_b]_{sep}$, (englobando o recuperador de calor e forno), compressor, $[\eta_b]_{comp}$, e bomba, $[\eta_b]_{bomba}$. As expressões destes rendimentos são as seguintes:

$$[\eta_b]_{sep} =$$

$$\frac{m_o(h_{os} - T_o s_{os}) + m_g(h_{gs} - T_o s_{gs}) + m_a(h_a - T_o s_a) - m_p(h_p - T_o s_p)}{Q_{aquec}\,(1 - \frac{T_0}{T})} \quad (6)$$

$$[\eta_b]_{comp} = \frac{m_g(b_{comps} - b_{compe})}{W_{comp}} \quad (7)$$

$$[\eta_b]_{bomba} = \frac{m_o(b_{bombs} - b_{bombe})}{W_{bomb}} \quad (8)$$

Nestas equações, Q_{aquec} é a carga de aquecimento, W_{comp} é a potência de compressão, W_{bomb} é a potência de bombeamento. Os índices os e gs indicam, respectivamente, saída do óleo do separador e saída do gás do separador. Os índices compe, comps, bombe e bombs, indicam, respectivamente, entrada e saída do compressor e bomba. T é a temperatura média do fluido de aquecimento do separador.

Definindo-se agora as relações f_i como sendo o quociente entre a exergia consumida por equipamento (separador, compressores e bombas) e a exergia consumida pela planta, tem-se:

$$f_{sep} = \frac{Q_{aquec}\,(1 - \frac{T_o}{T})}{B_{comb}} \quad (9)$$

$$f_{comp} = \frac{W_{comp}}{B_{comb}} \quad (10)$$

$$f_{bomba} = \frac{W_{bomb}}{B_{comb}} \quad (11)$$

Com as definições das relações f_i e considerando que o termo relativo à bomba refere-se apenas ao sistema de bombeamento de óleo (supõe-se assim que a água retirada do separador é descartada diretamente da planta sem necessidade de bombeamento), pode-se chegar a uma expressão que relaciona $[\eta_b]_{global}$ com os rendimentos dos equipamentos da planta de separação:

$$[\eta_b]_{global} = [\eta_b]_{sep} f_{sep} + [\eta_b]_{comp} f_{comp} + [\eta_b]_{bomb} f_{bomb} \quad (12)$$

com

$$f_{sep} + f_{comp} + f_{bomb} < 1 \quad (13)$$

devido às irreversibilidades existentes nos processos de aquecimento e compressão. Assim o rendimento global pode ser escrito como:

$$[\eta_b]_{global} = \Sigma\,(\,[\eta_b]_i\, f_i\,) \quad (14)$$

Desta forma caracteriza-se a importância de cada equipamento na utilização da exergia do insumo energético e no valor de $[\eta_b]_{global}$, quer no tocante à quantidade de exergia consumida, quer no que concerne à eficiência no processo de conversão de energia, possibilitando a identificação de potenciais formas de incremento do rendimento exergético da planta.

Considerando que o acionamento dos compressores e bombas seja feito por turbinas a gás com rendimento térmico η_t (o desenvolvimento mostrado a seguir é o mesmo caso o acionamento fosse feito por um motor a gás), que o recuperador de calor tenha rendimento térmico η_{rec} e o forno para aquecimento do petróleo tenha rendimento exergético η_{for}, a expressao que permite o cálculo da exergia consumida através da queima de combustível, necessária para alimentar as turbinas e forno, é:

$$B_{comb} = B_t + B_{for} \quad (15)$$

As duas parcelas da Equação 15 caracterizam, respectivamente, as taxas de consumo de exergia nas turbinas (B_t) e no forno (B_{for}) que consome gás natural, como indicado pelas Equações 16 e 17 (onde $\theta_{for}=1-T_o/T$):

$$B_t = \frac{1}{\eta_t}\left(\Sigma\left(W_{comp} + W_{bomb}\right)\right) \quad (16)$$

$$B_{for} = \frac{\theta_{for}}{\eta_{for}}\left(Q_{aquec} - \eta_{rec}\left(\frac{1}{\eta_t} - 1\right)\Sigma\left(W_{comp} + W_{bomb}\right)\right) \quad (17)$$

sendo a taxa de transferência de calor no forno (Q_{for}) dada por:

$$Q_{for} = \left(Q_{aquec} - \eta_{rec}\left(\frac{1}{\eta_t} - 1\right)\Sigma\left(W_{comp} + W_{bomb}\right)\right) \quad (18)$$

onde são desprezadas as perdas de calor através das superfícies externas das turbinas. Convém observar que a Equação 17 reduz-se à Equação 18 dividida pelo rendimento energético do forno (base Poder Calorífico Inferior), quando se aproxima o valor da exergia química do combustível (B_{ch}) do valor de seu Poder Calorífico Inferior.

A vazão mássica de combustível consumida nas turbinas e forno (m_{comb}) é então dada por:

$$m_{comb} = \frac{B_{comb}}{B_{ch}} \qquad (19)$$

O cálculo de m_{comb} permite que se estabeleça a relação entre as vazões mássicas de gás consumida (m_{comb}) e produzida pela planta de separação (m_g), ou consumo específico de gás combustível (ρ_m), definido como:

$$\rho_m = m_{comb} / m_g \qquad (20)$$

Este parâmetro também pode ser considerado um índice de desempenho da planta de separação.

AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DE UMA PLANTA TERRESTRE DE PROCESSAMENTO PRIMÁRIO

a) Descrição da Planta

A planta de processamento primário analisada é composta por um separador bifásico, um módulo de compressão com dois estágios e resfriamento intermediário, e um módulo de bombeamento com dois estágios. Petróleo é admitido na planta na seção ALIM, havendo três fluxos de saída: um de gás (seção GÁS) e dois de óleo (seção ÓLEO e 3). O acionamento dos compressores e bombas é feito através de motor a gás. O esquema da planta está mostrado na Figura 2 (as seções 1 e 2 são internas à planta).

São analisadas três condições de operação, visando o estudo comparativo entre a separação realizada a 25°C e a 60°C, com e sem recuperação do rejeito térmico do motor a gás. Nos casos com temperatura do petróleo de 60°C é necessário o emprego de um forno para fins de aquecimento do petróleo, mesmo quando há recuperação do rejeito térmico do motor a gás. As Tabelas 1, 2 e 3 apresentam, respectivamente, as frações molares dos componentes dos fluxos de petróleo, óleo e gás, e as variáveis importantes em várias seções da planta para a condição de T=25°C e T= 60°C.

b) Características de Desempenho

No desenvolvimento da análise da planta foi empregado o simulador de processos HYSIM, versão C 2.50 (1994), para fins de obtenção das propriedades termodinâmicas das substâncias consideradas e para a realização dos balanços de massa e energia para cada módulo. A equação de estado escolhida para a caracterização do comportamento do petróleo e seus derivados foi a equação de Peng-Robinson (1976). As características de desempenho dos equipamentos da planta estão listadas abaixo:

- rendimento politrópico de compressão: 0.75
- rendimento mecânico de compressores: 0.90
- rendimento de transmissão: 0.95
- rendimento de bombas: 0.75
- rendimento térmico de motores a gás: 0.35
- rendimento térmico de fornos: 0.85
- rendimento térmico de recuperadores de calor: 0.60

Na avaliação da vazão mássica de gás combustível consumida pelas plantas de processamento primário o poder calorífico inferior do gás foi calculado através do emprego do aplicativo ANÁLISE DE COMBUSTÍVEIS INDUSTRIAIS (1995). O cálculo da exergia química do gás combustível foi feito a partir do cálculo da exergia química de uma mistura de gases ideais, empregando-se os dados fornecidos por Kotas (1980).

As Tabelas 4 e 5 apresentam os valores dos insumos energéticos dos módulos e os insumos exergéticos da planta de separação, operando com temperatura de separação de 25°C e 60°C, sem e com recuperação do rejeito térmico do motor a gás.

c) Síntese dos Resultados Obtidos

As Tabelas 6, 7, 8 e 9 sintetizam os valores obtidos de desempenho global e dos módulos, para as três condições de operação analisadas, apresentando os valores de rendimento exergético global (η_{global}), relação entre as vazões mássicas de gás combustível e gás produzido na planta (ρ_m), relação entre a exergia consumida no módulo/equipamento 'i' e a exergia consumida pela planta (f_i), rendimento exergético do módulo/equipamento 'i' (η_i) e o produto $\eta_i f_i$.

A análise dos parâmetros mostrados nas tabelas apresentadas evidencia os aspectos relacionados a seguir.

- Os rendimentos exergéticos globais apresentam valores inferiores a 25%, uma vez que os sistemas consumidores de exergia são, predominantemente, sistemas cujo processo de conversão de energia baseia-se em reações de combustão existentes nos fornos e motores a gás;

- Rendimentos exergéticos globais crescentes estão associados a consumos específicos de gás combustível decrescentes;

- A mudança da condição de operação da planta de separação, alterando-se a temperatura de separação, aponta a necessidade de racionalização da operação de aquecimento do petróleo através da escolha criteriosa da temperatura de separação, devido ao impacto que esta operação tem no consumo de exergia da planta;

- As operações de aquecimento (quando existem) e de compressão são aquelas que utilizam a maior parte dos insumos exergéticos consumidos pelas plantas de processamento primário analisadas;

- Os módulos de separação, com aquecimento de petróleo, apresentam sempre os menores rendimentos encontrados nas plantas analisadas, devido à diferença entre o nível de temperatura do fluido de aquecimento e o nível de temperatura do petróleo;

- A mudança da temperatura de separação de 25°C para 60°C faz com que o rendimento exergético global caia de 0.212 para 0.109 (51.4% do valor inicial), enquanto que o consumo específico de gás combustível sofre um aumento de 145%;

SEÇÃO/ COMPONENTE	ALIM	ÓLEO (T=25°C)	ÓLEO (T=60°C)	GÁS (T=25°C)	GÁS (T=60°C)
Metano	0.0494	0.0004	0.0003	0.9423	0.9324
Etano	0.0012	0.0001	-	0.0223	0.0224
Propano	0.0007	0.0001	-	0.0112	0.0117
i-Butano	0.0002	0.0001	-	0.0029	0.0033
n-Butano	0.0005	0.0002	0.0001	0.0060	0.0073
i-Pentano	0.0002	0.0001	0.0001	0.0013	0.0020
n-Pentano	0.0005	0.0003	0.0002	0.0034	0.0055
n-Hexano	0.0010	0.0009	0.0006	0.0027	0.0056
n-Heptano	0.0017	0.0018	0.0015	0.0016	0.0032
n-Octano	0.0028	0.0029	0.0027	0.0008	0.0011
n-Nonano	0.0017	0.0018	0.0018	0.0002	0.0001
n-Decano	0.0017	0.0018	0.0018	0.0001	-
n-C11	0.0013	0.0014	0.0014	-	-
C12+	0.0120	0.0126	0.0127	-	-
H_2O	0.9251	0.9755	0.9769	0.0047	0.0047
CO_2	-	-	-	0.0006	0.0006

Tabela 1 - Frações Molares dos Componentes dos Fluxos de Entrada e Saída da Planta de Separação.

seção/variável	ALIM	ÓLEO	GÁS	3	1	2
m(t/h)	34.711	33.553	1.154	0.0038	33.553	1.157
p(bar)	4.0	70.0	70.0	16.5	4.0	4.0
T(°C)	25.0	26.0	179.4	40.0	25.0	25.0
H(kW)	-10611.3	-10714.7	293.7	-1.9	-10797.7	186.4
s(kJ/kgK)	2.6067	2.3656	9.3915	3.1915	2.3586	9.8018

p=pressão; H=fluxo de entalpia

Tabela 2 - Características dos Fluxos Mássicos nas Seções da Planta de Processamento Primário (T=25°C).

seção/variável	ALIM	ÓLEO	GÁS	3	1	2
m(t/h)	34.711	33.349	1.207	0.154	33.349	1.362
p(bar)	4.0	70.0	70.0	16.5	3.6	3.6
T(°C)	25.0	61.1	175.9	40.0	60.0	60.0
H(kW)	-10611.3	-9605.3	299.2	-33.4	-9690.5	237.2
s(kJ/kgK)	2.6067	2.7359	9.0943	2.0517	2.7291	9.3560

Tabela 3 - Características dos Fluxos Mássicos nas Seções da Planta de Processamento Primário (T=60°C).

INSUMO ENERGÉTICO	separação realizada a 25°C (kW)	separação realizada a 60°C (kW)
carga de aquecimento	-	1158
potência de compressão	200.3	229.4
potência de bombeamento	83.0	85.2

Tabela 4 - Insumos Energéticos dos Módulos/Equipamentos.

INSUMO EXERGÉTICO	separação realizada a 25°C (kW)	separação realizada a 60°C sem recuperação (kW)	separação realizada a 60°C com recuperação (kW)
consumido no forno	-	1421.0	917.9
consumido no motor a gás	988.0	1096.6	1096.6
consumo total	988.0	2517.6	2014.5

Tabela 5 - Insumos Exergéticos da Planta de Separação.

PARÂMETRO/CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO	η_{global}*	ρ_m
T=25°C	0.212	0.060
T=60°C	0.109	0.147
T=60°C com recuperação	0.136	0.136

* T_o=25°C, $\theta_{for} = \theta_{rec}$ =0.3 (onde θ_{rec}=1-T_o/T)

Tabela 6 Valores de η_{global} e ρ_m para as Plantas Analisadas.

MÓDULO/CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO	SEPARAÇÃO*	COMPRESSÃO	BOMBEAMENTO
T=25°C	-	0.203	0.084
T=60°C	0.138	0.091	0.034
T=60°C com recuperação	0.173	0.114	0.042

* T_o=25°C, θ_{for}= θ_{rec} =0.3

Tabela 7 Valores de f_i para os Módulos de Separação, Compressão e Bombeamento das Plantas Analisadas.

MÓDULO/CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO	SEPARAÇÃO*	COMPRESSÃO	BOMBEAMENTO
T=25°C	-	0.729	0.766
T=60°C	0.169	0.648	0.779
T=60°C com recuperação	0.169	0.648	0.779

* T_o=25°C, $\theta_{for} = \theta_{rec}$ =0.3

Tabela 8 - Valores de η_i para os Módulos de Separação, Compressão e Bombeamento das Plantas Analisadas.

MÓDULO/ CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO	SEPARAÇÃO*	COMPRESSÃO	BOMBEAMENTO
T=25°C	-	0.148	0.064
T=60°C	0.023	0.059	0.026
T=60°C com recuperação	0.029	0.074	0.033

* T_o=25°C, $\theta_{for} = \theta_{rec}$ =0.3

Tabela 9 Valores de η_i f_i para os Módulos de Separação, Compressão e Bombeamento das Plantas Analisadas.

Com relação à introdução da recuperação do rejeito térmico do motor a gás para suprir parte da carga térmica de aquecimento, na condição de aquecimento a 60°C, deve-se destacar que o rendimento exergético global sobe para 0.136, atestando a importância do emprego de recuperadores de calor nas plantas de separação.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A metodologia apresentada e utilizada neste artigo permite quantificar o rendimento exergético global de plantas de processamento primário de petróleo, bem como os rendimentos de subsistemas que a compõem. A definição do fator f_i possibilita quantificar a influência de cada subsistema da planta no consumo global de exergia (consumo de combustível). As análises realizadas nas três condições de operação de uma planta sintética de processamento primário evidenciam a importância do consumo de exergia nas operações de aquecimento de petróleo, bem como a necessidade de racionalizar esse consumo através da recuperação de rejeitos térmicos de turbinas e motores a gás e da escolha criteriosa da temperatura de aquecimento do petróleo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

HYSIM User's Guide - Version C1.50, 1991, Hyprotech Ltd.

ANÁLISE DE COMBUSTÍVEIS INDUSTRIAIS Manual de Operação, 1995, IPT

Kotas, T. J., 1985, "The Exergy Method of Thermal Plant Analysis", Butterworths, London.

Peng, D. Y. and Robinson, D. B., 1976, "A Two-Constant Equation of State", Ind. Eng. Chem. Fundamentals, v. 15, pp 59-64.

Oliveira Júnior, S. et alii, 1990, "New Structures and New Types of Heat Transformers" , Proceedings of the 3rd Brazilian Thermal Sciences Meeting, pp 883-888, Florianópolis (Brazil).

Tsatsaronis, G., 1995, "On the Efficiency of Energy Systems", Proceedings of the International Conference ECOS'95 , pp 53-60, Istanbul

ABSTRACT

This paper presents the exergy analysis of petroleum separation processes that take place in offshore and onshore plants in order to characterize the thermodynamic performance of these processes and identify possible ways of increasing the overall performance of the plant.This analysis is employed to evaluate the performance of a typical Brazilian onshore platform.

SIMULATION OF CROSS FLOW PAST A TUBE BANK EMPLOYING AN ADAPTIVE PARALLEL / VECTOR FINITE ELEMENT PROCEDURE

Paulo A. B. de Sampaio
Instituto de Engenharia Nuclear
Comissão Nacional de Energia Nuclear
21945-970 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil

Álvaro L.G.A. Coutinho
Programa de Engenharia Civil, COPPE
Universidade Federal do Rio de Janeiro
21945-910 - Rio de Janeiro - RJ - Brasil

SUMMARY

The numerical simulation of complex flows demands efficient algorithms and fast computer platforms. The use of adaptive techniques permits adjusting the discretisation according to the analysis requirements, but creates variable computational loads which are difficult to manage in a parallel / vector program. This paper describes the approach we have adopted to implement an adaptive finite element incompressible Navier-Stokes solver on the Cray J98 machine. Performance measurements for the simulation of cross flow past a tube bank indicate that the techniques employed result in a fast parallel / vector code.

INTRODUCTION

Analytical solutions of fluid flow problems are restricted to few situations where simplified models and hypothesis are applicable. In order to match the engineering needs to deal with flows of industrial complexity, numerical and experimental techniques are required. Though the laboratory and the computer have been complementary tools in understanding fluid flow phenomena, one can clearly identify the growing importance of Computational Fluid Dynamics (CFD) in the technological development of recent decades. The expanding role played by numerical analysis of flow problems is prompted by economical reasons, which are in turn connected to the development of computer technology and new solution algorithms.

In this work we apply adaptive solution procedures, combining mesh and time-step control, to the solution of incompressible viscous flows with heat transfer. Such techniques are effective on adjusting the discretisation according to the physics of the underlying problem. However, they create variable computational loads which make them difficult to implement with efficiency in parallel / vector supercomputers.

A symmetric Petrov-Galerkin formulation, which automatically introduces *streamline upwinding* and permits equal order interpolation for velocity and pressure, is applied to the incompressible Navier-Stokes equations and to the energy balance (De Sampaio et al., 1993). The adaptive techniques employed include remeshing, based on the Z-Z error estimator (Zienkiewicz and Zhu, 1987), and the use of local time-steps defined by the local velocity, physical properties and mesh size (De Sampaio, 1993), (De Sampaio and Coutinho, 1995).

The parallel / vector implementation on the Cray J98 installed at COPPE / UFRJ is described. A dynamic mesh colouring scheme is applied to the computational meshes in order to split the finite elements into groups that can be processed in parallel / vector mode within an element-by-element (EBE) preconditioned conjugate gradient solver (Hughes et al., 1987), (Coutinho et al., 1993).

The adaptive simulation of cross flow past a tube bank, a problem of particular interest to the nuclear industry, is presented. Performance measurements on the Cray J98 demonstrate the effectiveness of the numerical techniques employed.

THE CONTINUUM AND DISCRETE MODELS

We present here the finite element formulation used for the simulation of incompressible viscous flows with heat transfer. The problem is defined on the open bounded domain Ω, with boundary Γ, contained in the *nsd*-dimensional Euclidean space. The continuum model comprises the incompressible Navier-Stokes equations and the transient energy balance. These equations are written using the summation convention for $a = 1, \ldots, nsd$ and $b = 1, \ldots, nsd$ as

$$\rho\left(\frac{\partial u_a}{\partial t} + u_b \frac{\partial u_a}{\partial x_b}\right) - \frac{\partial}{\partial x_b}\left[\mu\left(\frac{\partial u_a}{\partial x_b} + \frac{\partial u_b}{\partial x_a}\right)\right] + \frac{\partial p}{\partial x_a} = 0 \qquad (1)$$

$$\frac{\partial u_a}{\partial x_a} = 0 \qquad (2)$$

$$\rho c\left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + u_b \frac{\partial \theta}{\partial x_b}\right) - \frac{\partial}{\partial x_b}\left(\kappa \frac{\partial \theta}{\partial x_b}\right) = 0 \qquad (3)$$

In the above equations u_a, p and θ denote velocity, pressure and temperature. Note that ρ, c, μ, κ are, respectively, the fluid density, specific heat, viscosity and thermal conductivity. The model is completed introducing boundary conditions and initial velocity and temperature fields.

Velocity and traction boundary conditions are given data u_a and t_a, respectively prescribed on the boundary partitions Γ_{ua} and Γ_{ta}, such that $\Gamma_{ua} \cup \Gamma_{ta} = \Gamma$ and $\Gamma_{ua} \cap \Gamma_{ta} = \varnothing$.

Similarly, temperature and heat flux are given data θ and q, which are prescribed on boundary partitions Γ_θ and Γ_q, such that $\Gamma_\theta \cup \Gamma_q = \Gamma$ and $\Gamma_\theta \cap \Gamma_q = \varnothing$.

Pressure and mass flux boundary conditions are associated to the mass balance and are given as p and G on the boundary partitions Γ_p and Γ_G, such that $\Gamma_p \cup \Gamma_G = \Gamma$ and $\Gamma_p \cap \Gamma_G = \varnothing$.

Note that the incompressible flow model (1)-(3) involves pressure gradients but not pressure itself. Thus, at least one reference pressure value must be given in order to define a unique pressure field.

The continnum model is discretised using linear triangular elements to approximate velocity, pressure and temperature. Such a choice of interpolating spaces is not acceptable within the mixed-formulation framework, as it violates the Babuška-Brezzi condition (Brezzi and Fortin, 1991). However, the Petrov-Galerkin formulation we shall present next avoids such a difficulty through the introduction of extra stabilising terms (Hughes et al., 1986), (De Sampaio, 1991). The formulation also leads to better approximations of convection dominated flows, for it generates *streamline upwinding* (Brooks and Hughes, 1982), (De Sampaio, 1991). For a detailed description of of the stabilised method used in this work, the reader is referred to the original sources (De Sampaio, 1991), (De Sampaio et al., 1993).

The following discretised model is obtained by least-squares minimisation of the time-discretised momentum and energy balances with respect to the velocity, pressure and temperature degrees of freedom. The pressure-continuity equation Eq. (6) results from the combination of the least-squares momentum minimisation and the requirement of flow incompressibility Eq.(2). The discretised momentum and energy balances are, respectively,

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \frac{\rho}{\Delta t}\left(N_i + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\right)\left(\hat{u}_a^{n+1} + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^{n+1}}{\partial x_b}\right) d\Omega = \\
&\int_\Omega \frac{\rho}{\Delta t}\left(N_i + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\right)\left(\hat{u}_a^n - \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b}\right) d\Omega + \\
&\int_\Omega \frac{\partial N_i}{\partial x_a}\hat{p}^{n+1/2} d\Omega - \int_\Omega \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\frac{\partial \hat{p}^{n+1/2}}{\partial x_a} d\Omega \\
&-\int_\Omega \frac{\partial N_i}{\partial x_b}\mu\left(\frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_a}\right) d\Omega + \int_{\Gamma_{ta}} N_i t_a \, d\Gamma + \\
&\sum_e \int_{\Omega e} \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\frac{\partial}{\partial x_b}\left[\mu\left(\frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_a}\right)\right] d\Omega
\end{aligned} \tag{4}$$

and

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \frac{\rho c}{\Delta t}\left(N_i + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\right)\left(\hat{\theta}^{n+1} + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{\theta}^{n+1}}{\partial x_b}\right) d\Omega = \\
&\int_\Omega \frac{\rho c}{\Delta t}\left(N_i + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\right)\left(\hat{\theta}^n - \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{\theta}^n}{\partial x_b}\right) d\Omega \\
&-\int_\Omega \frac{\partial N_i}{\partial x_b}\kappa \frac{\partial \theta}{\partial x_b} d\Omega - \int_{\Gamma_q} N_i q \, d\Gamma + \\
&\sum_e \int_{\Omega e} \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c}\frac{\partial}{\partial x_b}\left(\kappa \frac{\partial \theta}{\partial x_b}\right) d\Omega
\end{aligned} \tag{5}$$

whilst the pressure-continuity equation is given by

$$\begin{aligned}
&\int_\Omega \frac{\partial N_i}{\partial x_a}\frac{\partial \hat{p}^{n+1/2}}{\partial x_a} d\Omega = -\int_\Omega \frac{\partial N_i}{\partial x_a}\rho \hat{u}_b^n \frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} d\Omega \\
&-\int_\Omega \frac{\rho}{\Delta t} N_i \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_b} d\Omega + \sum_e \int_{\Omega e} \frac{\partial N_i}{\partial x_a}\mu\left(\frac{\partial \hat{u}_a^n}{\partial x_b} + \frac{\partial \hat{u}_b^n}{\partial x_a}\right) d\Omega \\
&-\int_{\Gamma_G} N_i \left(\frac{G^{n+1} - G^n}{\Delta t}\right) d\Gamma
\end{aligned} \tag{6}$$

In the above equations $\hat{u}_a$, $\hat{p}$ and $\hat{\theta}$ are the discretised fields, interpolated using standard C_0 finite elements whose shape functions are denoted by N_i. The superscripts n, $n+1/2$ and $n+1$ indicate the time-level. Note that the terms explicitly written as summation of element integrals vanish altogether for the linear shape functions used.

The problem is solved using a segregated solution procedure. Pressure is computed first, then the velocity and the temperature fields are updated. Eq. (4)-(6) lead to symmetric positive definite matrices, allowing the use of preconditioned conjugate-gradient solvers.

Discretisations similar to that presented here have been obtained by (Zienkiewicz and Wu, 1991) following alternative approaches. The procedure can be extended to the analysis of natural convection problems with the inclusion of buoyancy forces in Eq.(1) (De Sampaio and Coutinho, 1995).

THE LOCAL TIME-STEPPING SCHEME

The weighting functions applied to the momentum and energy balances have the *streamline upwind Petrov-Galerkin* structure (Brooks and Hughes, 1982).

$$W_i = N_i + \frac{\Delta t}{2}\hat{u}_c^n \frac{\partial N_i}{\partial x_c} \tag{7}$$

In fact, a proper amount of *streamline upwinding* is introduced in the momentum balance chosing the time-step as

$$\Delta t = \left[\tanh^{-1}\left(\frac{R_e}{2}\right) - \frac{2}{R_e}\right]\frac{h_e}{|\mathbf{u}^n|} \tag{8}$$

where $|\mathbf{u}^n|$ is the velocity modulus and h_e is the characteristic element size (the square root of the element area). The element Reynolds number R_e is formed using $|\mathbf{u}^n|$ and h_e.

It is interesting to notice that the time-step given by Eq.(8) is appropriate to follow the time evolution of the convection-diffusion processes resolvable in a mesh with local size h_e (De Sampaio, 1991). Indeed, Eq.(8) gives for pure convection $\Delta t = h_e / |\mathbf{u}^n|$ whereas for pure diffusion $\Delta t = \rho h_e^2 / 6\mu$. The relationship between the time-step given by Eq.(8), also called the *intrinsic time scale*, and the modelling of the subgrid (or unresolvable) scales was investigated in a recent paper by (Hughes, 1995).

In order to introduce optimal *upwinding* in the fluid energy equation, we have to replace the element Reynolds number in Eq.(8) by the element Peclet number $P_e = R_e P_r$, where $P_r = \mu c / \kappa$ is the Prandtl number. Clearly, unless the Prandtl number is one, the time-scales for the momentum and energy equations will differ. Furthermore, note that the time-step given by Eq.(8) varies spatially according to local values of velocity, physical properties and mesh size. If optimal *upwinding* is to be introduced in both momentum and energy balances, we need to consider two distinct spatially varying time-step distributions.

We employ here an algorithm which allows each degree of freedom to advance in time according to its own local time-step, whilst interpolated results are periodically output at fixed times (De Sampaio, 1993). The algorithm starts with all degrees of freedom *active* and with variables defined at time t^n. Then, it proceeds as follows:

a) Set element time-steps for velocity and pressure using the corresponding R_e and element time-steps for temperature using the corresponding P_e.

b) Project the element time-step values onto mesh nodes, obtaining nodal time-step distributions for $\hat{u}_a$, $\hat{p}$ and $\hat{\theta}$.

c) Choose an interpolation time-step Δt_{int} between the minimum (Δt_{min}) and the maximum (Δt_{max}) time-scales.

d) Define the interpolation time-level $t_{int} = t^n + \Delta t_{int}$.

e) Solve equations (4)-(6) for the *active* degrees of freedom using the respective nodal time-step distributions.

f) Interpolate, on the time domain, the degrees of freedom whose tracked time have exceeded t_{int} and freeze their interpolated values at t_{int}. These degrees of freedom are temporarily removed from the list of *active* variables and treated as *pseudo* boundary conditions for the problem defined in terms of the remaining *active* variables.

g) Are there any *active* variables left ?

If yes:

g1) Recompute the local time-steps for the remaining *active* variables and return to step e.

If no:

g2) Output the solution at t_{int}.

g3) Release the *inactive* (frozen) degrees of freedom.

g4) Redefine $t^n = t_{int}$ and return to step a.

The process continues until the required analysis time interval has been covered. Note that the extra bookeeping needed for tracking each degree of freedom time *position* pays off in computational effort, for degrees of freedom associated to larger time-steps are updated less frequently than those associated to smaller ones. The algorithm described above leads to a weighting function adaptive method, where the local time-step is adjusted according to the local velocity, physical properties and mesh size, aiming to optimise the approximation on a given mesh.

ADAPTIVE REMESHING

Much progress has been achieved in the field of finite element mesh adaptivity. The rapid development is both a consequence of the research on error estimates (Babuška et al., 1986), (Zienkiewicz and Zhu, 1987) and of the availability of mesh generator routines capable of using the error data to build improved meshes (Peraire et al., 1987).

It is important to remark that a remeshing scheme concerns only the spatial discretisation. However, when dealing with transient processes the overall error in the solution is associated not only to the spatial discretisation, but also to the time integration of the governing equations. Thus, some form of time-step adaptation is necessary, as far as a transient analysis is concerned.

In this work the *a posteriori* error estimator proposed by (Zienkiewicz and Zhu, 1987) is used to estimate the velocity gradient error and to guide the remeshing. The local time-stepping algorithm is used in conjunction with the remeshing scheme. This permits linking spatial and time-step refinement through Eq.(8) and naturally leads to a simultaneous time-space adaptive procedure. Indeed, whenever the remeshing scheme creates some local refinement to better resolve a particular flow feature, the time-step distribution is also adapted accordingly, so that the corresponding time evolution can be appropriately followed.

The velocity gradient error is estimated according to

$$\|E\|_\Omega = \left[\int_\Omega \left(\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a\right)\left(\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a\right) d\Omega \right]^{1/2} \tag{9}$$

where $\nabla \hat{u}_a$ is the discontinuous gradient computed directly from the analysis and ∇u_a^* is the smoothed gradient obtained by least-squares projection of $\nabla \hat{u}_a$ onto the continuous finite element basis (De Sampaio et al., 1993).

We can also define the following measure of the velocity gradient $\|S\|_\Omega$ and the relative error η

$$\|S\|_\Omega = \left[\int_\Omega \nabla u_a^* \nabla u_a^* \, d\Omega \right]^{1/2} \tag{10}$$

$$\eta = \frac{\|E\|_\Omega}{\|S\|_\Omega} \tag{11}$$

If Ω_i is the sub-domain associated to a typical element i, the corresponding element error is

$$\|e\|_{\Omega i} = \left[\int_{\Omega i} \left(\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a\right)\left(\nabla u_a^* - \nabla \hat{u}_a\right) d\Omega \right]^{1/2} \tag{12}$$

Note that the domain error given by Eq.(9) is related to the individual element errors according to

$$\|E\|_\Omega^2 = \sum_{i=1}^{m} \|e\|_{\Omega i}^2 \tag{13}$$

where m is the number of elements in the mesh. Thus, one can compute the average error per element e_m as

$$e_m = \frac{\|E\|_\Omega}{\sqrt{m}} \tag{14}$$

or, in terms of the relative error η,

$$\bar{e}_m = \eta \frac{\|S\|_\Omega}{\sqrt{m}} \tag{15}$$

The remeshing scheme is based on the concept of generating a new mesh in such a way that the error will become uniformly distributed among the new elements. This requires defining a target error per element and leads to various alternative strategies.

In a previous work (De Sampaio et al., 1993) we have followed (Zienkiewicz and Zhu, 1987) and used Eq.(15) to set the remeshing target error per element according to the user prescribed aimed analysis quality $\bar{\eta}$. Such an approach focus on keeping a *nearly* constant error level, while letting the number of elements to vary. In the remeshing procedure we shall present next the priority is somewhat reversed. In fact, we let the error level to be adjusted during the analysis according to a user defined maximum allowable number of elements. This seems to be more budget oriented than the previous implementation, where an excessive number of elements was sometimes created.

Let us suppose that through a remeshing scheme, starting with a coarse mesh containing m elements, we could obtain a refined mesh with m' elements, such that $m' > m$. Let us further

assume that the refined mesh is optimal in the sense that the error is evenly distributed among the m' elements. Then, using Eq.(14), the ratio between the average error per element measured on such meshes is $\bar{e}_{m'} / \bar{e}_m = \sqrt{m}\,\|E'\|_\Omega / \sqrt{m'}\,\|E\|_\Omega$. Noting that the domain error in the refined optimal mesh is smaller than that on the coarse mesh, we conclude that $\bar{e}_{m'} / \bar{e}_m = \sqrt{m} / \sqrt{m''}$ for some $m'' > m'$.

In view of the above remarks, the following target error per element is chosen for remeshing

$$\bar{e}_t = \sqrt{\frac{m}{m''}}\,\bar{e}_m \tag{16}$$

where m'' is the user prescribed maximum number of elements, m is the number of elements in the current mesh and $\bar{e}_m$ is the average error per element measured on the current mesh.

For the linear elements employed in the computation we assume the individual element errors are proportional to the corresponding element sizes. Thus, we can define the new element size distribution required to attain the target error $\bar{e}_t$ on every element of the new mesh. The new element size distribution can be expressed in terms of the element sizes and errors on the current mesh and of the uniform target error $\bar{e}_t$ aimed for the new mesh.

$$h_i^{k+1} = h_i^k \frac{\bar{e}_t}{\|e\|_{\Omega i}} \qquad \text{for } i = 1,\ldots, m \tag{17}$$

where $k+1$ and k denote the new and the current mesh respectively.

In some applications it is necessary to limit the minimum acceptable element size as the time-step computed from Eq.(8) may become too small for an affordable computation. Note that Eq.(17) gives a piecewise continuous element size distribution for the new mesh which is, however, defined on the current mesh. The mesh generator used in this work requires the element size distribution to be continuous and defined on the nodes of a specified background mesh. Therefore, the size distribution given by Eq.(17) is projected to the nodes of the current mesh, via least squares smoothing, and then transfered to the background mesh nodes.

A Delaunay mesh generator is employed to construct meshes composed of triangular elements. The problem is defined on a initial mesh containing boundary and initial condition data. This initial mesh is used as the background mesh from which all subsequent meshes will be generated by the insertion of new points and the application of Bowyer's algorithm to connect the newly created points in a Delaunay triangulation (Bowyer, 1981). In such an approach the background mesh is indeed a computational mesh, which is actually used to start the computation.

The automatic remeshing is controlled by the variation of the relative error given by Eq.(11). A new mesh is constructed whenever the relative error varies more than one percent during the transient analysis.

Another important aspect in a remeshing procedure concerns the interpolation of field data between two consecutive computational meshes. This problem has been addressed in (De Sampaio et al., 1993) where the deleterious effect of a simple linear interpolation was demonstrated. The low/high order interpolation scheme proposed in (De Sampaio et al., 1993) has been used here to avoid the introduction of spurious dissipation when data transfer between meshes is required.

Many operations described above depend on finding the element which contains a point given by its coordinates. If not carefully programmed these search operations become quite CPU consuming and may severely undermine the overall code performance.

The neighbour-to-neighbour search algorithm indicated in Figure 1 is used in this work (Peraire et al., 1987). According to (Löhner, 1995), provided a close enough starting element is given to initiate the search, this algorithm, though scalar, outperforms other vectorised procedures. We have devised a simple data structure to guarantee that the searches required in our computations always start from a close element. Because all meshes produced are obtained by refinement of the same background mesh, we can use the elements of the background mesh as regions to which all points and elements are reffered. Thus, if the point we are searching is associated to a given background region, we ensure that the starting element for the search belongs to the same region. The neighbour-to-neighbour algorithm works well for convex regions but may eventually fail otherwise. Thus we have programmed a vectorised search on all elements as a fall back position. This is activated whenever the neighbour-to-neighbour scheme fails to find the desired point after visiting 20 elements.

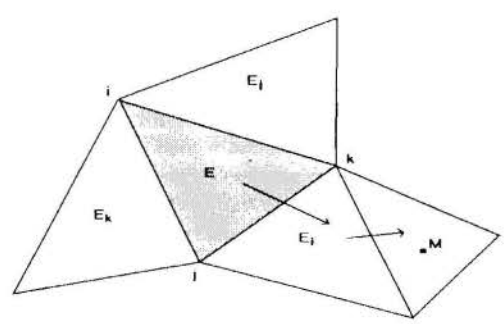


Figure 1. The neighbour-to-neighbour search algorithm. The area coordinates L_i, L_j and L_k of element E are evaluated at the searched point M. Here, $L_i(M) = min\left(L_i(M), L_j(M), L_k(M)\right)$ and the next element to be checked is E_i. The algorithm is repeated until the element containing point M is found.

THE PARALLEL / VECTOR ITERATIVE SOLVER

Provided the mesh generator and the searching routines are programmed efficiently, the updating of variables is the most time consuming operation in the whole analysis. The updating of the velocity, pressure and temperature fields demands the cyclic solution of four symmetric positive definite systems of equations. These systems are solved using a Jacobi preconditioned element-by-element (EBE) conjugate gradient (CG) method. Note that sparse matrix-vector multiplications are required during the CG computation. Due to the local nature of finite element approximation, the sparse matrix-vector product can be recast in the form,

$$\mathbf{Ax} = \sum_{e=1}^{nel} \mathbf{A}_e \mathbf{x}_e \tag{18}$$

where nel is the current number of elements in the mesh. Thus, the computations involve only the element matrices, without the

burden of assembling and handling large global sparse matrices.

The implementation of the element-by-element (EBE) matrix-vector multiplication follows the three-step algorithm:

```
for each element e do
   GATHER          x_e from x
   COMPUTE         v_e = A_e x_e
   SCATTER + ADD   v = v + v_e
end do.
```

The above algorithm has a great potential for vectorisation and parallelisation since the GATHER and COMPUTE steps can be performed independently from the other elements. However, the SCATTER + ADD step involves a write operation on a global array. For adjacent elements write operations are performed on shared addresses in $\mathbf{v}$. Therefore, the SCATTER + ADD operations can only be performed concurrently within a group of non-adjacent elements. Groups of non-adjacent elements can be constructed reordering the elements before starting the computations by a mesh colouring algorithm, producing a pattern like the one shown in Fig. 2. The element grouping requires a small fraction of CPU time and is performed before starting computations on the current mesh. Note, though, that the local time-stepping scheme used in this work implies variable lists of active elements and degrees of freedom. Therefore, prior to each CG solution, the groups are edited to extract the current active elements.The EBE computations within a group (colour) can be readily vectorised and distributed for multiple processors using the *autotasking* facilities available in Cray machines. This approach yields vector lengths of the size of the current number of elements in a group. Consequently, the colouring algorithm should attempt to produce groups with approximately the same number of elements. It is important to note that storage requirements in the EBE scheme are directly proportional to the number of elements in the mesh. Further, we do not evaluate and store the element matrices. We actually compute the action of the element on the product. Thus, geometric factors, shape functions etc are recomputed as they are needed. The resulting solution strategy keeps storage at a minimum and is a parallel / vector matrix-free method.

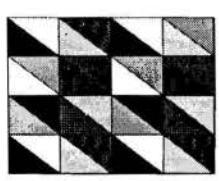


Figure 2 Multi- colouring grouping of finite elements.

SIMULATION OF CROSS FLOW PAST A TUBE BANK

We present here the simulation of cross flow past a tube bank. The fluid is confined between two horizontal plates which direct the flow towards a regular array of 5x5 cylinders. The pitch / diameter ratio is p/d = 1.33 and the ratio between the plates distance l and the diameter d is l/d = 6.65. A uniform velocity profile u_0 is assumed at the flow entrance and free traction boundary conditions are imposed at the outflow. The Reynolds number, defined by u_0 and l, is R_l = 665 and the Prandtl number is P_r=1. Non-slip boundary conditions are imposed on all solid surfaces. The non-dimensionalised temperature at the inlet is $\theta^* = 0$, whilst the temperature at the surface of the cylinders is fixed at $\theta^* = 1$. The initial fluid temperature is $\theta^* = 0$.

The transient analysis was run from $t = 0$ to $t = 20\ d / u_0$. A total number of 499 adaptive meshes have been automatically constructed. The maximum number of elements prescribed for remeshing was m'' = 40000 and the prescribed minimum characteristic element size was $h_e = 0.02d$. The average number of elements and degrees of freedom per mesh was approximately 25000 and 50000, respectively. The transient analysis required 11000 time interpolation steps Δt_{int}. Some results of this simulation are shown in Figure 3.

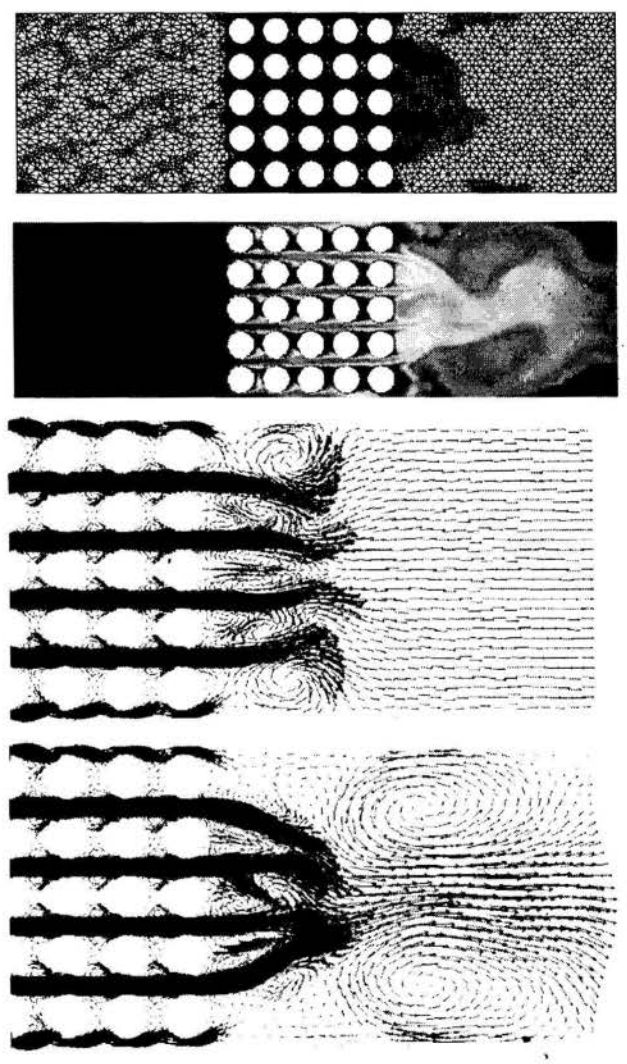


Figure 3. Simulation of a confined cross flow past a tube bank. From top to bottom: mesh at $t=8\ d / u_0$ and corresponding non-dimensionalised temperature, velocity field at $t = 2.5\ d / u_0$ and at $t = 11\ d / u_0$, respectively.

The parallel / vector performance on the Cray J98 has been analysed, trying to follow as much as possible the guidelines from (Crowl, 1994). The basic variables for the performance measurements are *flops* rate and *speed-up* factor. The *flops* rates are evaluated using the hardware performance monitor (*hpm*) and the profiling tool (*perfview*) on a single CPU version of the code, where vectorisation is the main issue. Parallel *speed-up* is evaluated by the *atexpert* tool during a 4 CPUs run.

The CPU time of the vectorised single processor run was 54.5 hours. The sustained job performance on this run was 109.3 *Mflops*, indicating a highly efficient vectorised code. Table 1 presents the *Mflops* rates obtained for the most relevant inner kernels during the single CPU run. In this table, *solvpr* and *solvel* stand for the conjugate gradient updating of pressure and velocity, respectively; *mshcol* is the mesh colouring algorithm which performs only integer operations; *newpts* is the point creation routine used in the mesh generator procedure.

Table 1 - Performance summary (1 CPU)

ROUTINES	% CPU time	Mflops
solvpr	76.3	91.7
mshcol	7.8	0.0
solvel	2.3	99.9
newpts	2.1	144.5

Computational costs are dominated by the pressure update, which requires the solution of the discretised Poisson Eq.(6). The updating of velocity and temperature also involves the solution of linearised equation systems but is much less expensive. This happens because we are using the last available solutions to start the conjugate-gradient, whilst closely following the time-scales of the momentum and energy convection-diffusion processes.

Even though a total of 499 meshes have been generated during the transient, the cost of mesh generation, mesh colouring and data transfer between meshes (including searching routines) represent only 11 % of the overall solution cost.

Regarding the parallel performance in 4 CPUs, we have obtained the actual *speed-up* of 1.72 in a non-dedicated run. The *atexpert* tool predicts a *speed-up* of 3.4 for a dedicated run.

CONCLUDING REMARKS

An adaptive parallel / vector finite element procedure for the simulation of incompressible viscous flows with heat transfer has been presented. The algorithm involves space and time adaptation in unstructured meshes. According to (Simon, 1993), that is the hardest class among parallel applications. In spite of such difficulties, good performance has been achieved in the simulation of cross flow past a tube bank on the Cray J98.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors kindly acknowledge the Center for Parallel Computation of COPPE / UFRJ for the use of the Cray J98. This work is partially sponsored by CNPq Grant No. 520589/95-5.

REFERENCES

Babuška, I., Zienkiewicz, O.C., Gago, J., Oliveira, E.R.A., 1986, "Accuracy Estimates and Adaptive Refinements in Finite Element Computations", John Wiley & Sons.

Bowyer, A., 1981, "Computing Dirichlet Tessellations", *The Computer Journal*, Vol. 24, pp. 162-166.

Brezzi, F. and Fortin, M., 1991, "Mixed and Hybrid Finite Element Methods", Springer-Verlag, New York, USA.

Brooks, A. and Hughes, T.J.R., 1982, "Streamline Upwind / Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations", *Comp.Meth..Appl.Mech.Eng.*, Vol. 32, pp. 199-259.

Coutinho, A.L.G.A., Alves, J.L.D., Landau, L. and Ebecken, N.F.F., 1993, "Avaliação de Estratégias Computacionais para o Método dos Elementos Finitos em Computadores Vetoriais", *Rev. Int. de Met. Num. para Calculo y Diseño en Ingenieria*, Vol. 9(3), pp. 271-297.

Crowl, L.A., 1994, "How to Measure, Present and Compare Parallel Performance", IEEE Parallel and Distributed Technology, Spring, pp. 9-25.

De Sampaio, P.A.B., 1991,"A Petrov-Galerkin Formulation for the Incompressible Navier-Stokes Equations using Equal Order Interpolation for Velocity and Pressure", *Int. J.Num.Meth.Eng.*, Vol. 31, pp. 1135-1149.

De Sampaio, P.A.B., Lyra, P.R.M., Morgan, K. and Weatherill, N.P, 1993, "Petrov-Galerkin Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations in Primitive Variables with Adaptive Remeshing", *Comp.Meth..Appl.Mech.Eng.*, Vol. 106, pp. 143-178.

De Sampaio, P.A.B., 1993, "Transient Solutions of the Incompressible Navier-Stokes Equations in Primitive Variables Employing Optimal Local Time-Stepping", *Proceedings, 8th International Conference on Numerical Methods for Laminar and Turbulent Flow*, C. Taylor, ed., Pineridge Press, Swansea, UK, Vol. 8(2), pp. 1493-1504.

De Sampaio, P.A.B. and Coutinho, A.L.G.A., 1995, "Parallel/Vector Finite Element Simulation of Coupled Flow and Heat Transfer, *Proceedings, 16th Iberian Latin American Conference on Computational Methods for Engineering*, Curitiba, Brazil, pp. 1401-1410.

Hughes, T.J.R., Franca, L.P. and Ballestra, M., 1986, "A New Finite Element Formulation for Computational Fluid Dynamics: V. Circumventing the Babuška-Brezzi condition: A Stable Petrov - Galerkin Formulation of the Stokes Problem Accommodating Equal Order Interpolations", *Comp.Meth..Appl.Mech.Eng.*, Vol. 59, pp. 85-89.

Hughes, T.J.R., Ferencz, R.M., Hallquist, J.O., 1987, "Large-Scale Vectorized Implicit Calculations in Solid Mechanics on a CRAY X-MP/48 utilising EBE Preconditioned Conjugate Gradients", *Comp.Meth..Appl.Mech.Eng.*, Vol. 61, pp. 215-248.

Hughes, T.J.R., 1995, "Multiscale Phenomena: Green's Functions, Subgrid Scale Models, Bubbles, and the Origins of Stabilized Methods", *Proceedings, 9th International Conference on Finite Elements in Fluids*, Venezia, Italia, pp. 99-114.

Löhner, R., 1995, "Robust, Vectorized Search Algorithms for Interpolation on Unstructured Grids", *J.Comp.Phys.*, Vol. 118, pp. 380-387.

Peraire, J., Vahdati, M., Morgan, K. and Zienkiewicz, O.C., 1987, "Adaptive Remeshing for Compressible Flow Computations", *J.Comp.Phys.*, Vol. 72, pp. 449-466.

Simon, H.D., 1993, "High Performance Computing: Architecture, Software and Algorithms", NASA Ames Research Center, NAS Report RNR-93-018.

Zienkiewicz, O.C. and Zhu, J.Z., 1987, "A Simple Error Estimator and Adaptive Procedure for Practical Engineering Analysis", *Int. J.Num.Meth.Eng.*, Vol. 24, pp. 337-357.

Zienkiewicz O.C. and Wu, J., 1991, "Incompressibility without Tears-How to Avoid Restrictions of Mixed Formulation", *Int. J.Num.Meth.Eng.*, Vol. 32, pp. 1189-1203.

TRANSIENT THREE-DIMENSIONAL ANALYSIS OF THERMAL FIELD IN STEEL AT HIGH TEMPERATURES VIA *GGLS* METHOD

E. G. D. do Carmo, F. A. O. Q. Braga e P. L. da Nóbrega
LASME/COPPE/UFRJ
C.P. 68509 - RJ - Brasil, CEP 21945-970

SUMMARY

Between 800^{0}C and 400^{0}C cooling has a strong radiation character attached to natural or forced convection producing strong thermal gradients. In this work we present the analysis of the temperature field using the Galerkin method and the *GGLS* method. Numerical results show the superiority of the *GGLS* method for this class of problems.

INTRODUCTION

Steel slabs are produced by the steel industry and kept in cooling areas at temperatures around 800 ^{0}C.

For the product's quality to be guaranteeded, it's fundamental that the residual stresses coming from thermal stresses due to cooling are under control.

This way, it's necessary in the evaluation of thermal stress, the precise determination of the thermal field transient.

Between 800^{0}C and 400^{0}C cooling has a strong radiation character attached to natural or forced convection producing strong thermal gradients. Besides that, the values to the thermal difusivity make the classic method of Galerkin for finite elements produce spurious oscilations, unless that an extremely refined mesh is used.

To improve Galerkin's method, the method ***Gradient Galerkin Least-Squares*** **(*GGLS*)** for finite elements was developed. This method was succesfully used in the temperature analysis to heat exchangers as shown in Franca and do Carmo (1989b).

In this work a three-dimensional analysis of the temperature field is done, during the steel slabs cooling, using the *GGLS* method, being the obtained results compared to Galerkin's classic method. These results show that, for this type of problem, as the use of the *GGLS* method is very important to have precise results in acceptable computational time.

THE PHYSICAL PROBLEM

Consider a bounded domain $\Omega \subset \Re^3$ with boundary Γ, $\Re^3$ being the Euclidean three-dimensional space. The physical problem consist: given $\mathrm{T}_0 \in L^2(\Omega)$, $\mathrm{T}_{\mathrm{ref}} \in H^{1/2}(\Gamma)$, $\mathrm{T}_{\mathrm{bulk}} \in H^{1/2}(\Gamma)$, $f \in H^{-1}(\Omega)$, for each $t \in (0,\infty)$ fixed, find $\mathrm{T} \in H^1(\Omega)$ so that:

$$-\underset{\sim}{\nabla}\cdot\left[D\underset{\sim}{\nabla}\mathrm{T}\right] + \rho c_p \frac{\partial \mathrm{T}}{\partial t} = f\left(\underset{\sim}{x},t\right) \text{ in } H^{-1}(\Omega) \ ,$$

$$\mathrm{T}\left(x,0\right) = \mathrm{T}_0\left(\underset{\sim}{x}\right) \text{ in } L^2(\Omega) \ ,$$

$$D\underset{\sim}{\nabla}\mathrm{T}\cdot\underset{\sim}{\mathrm{n}}\Big|_\Gamma + \left[\sigma \mathrm{T}^4 + h_{conv}\mathrm{T}\right]_\Gamma =$$

$$\left[\sigma \mathrm{T}_{\mathrm{ref}}^4\left(\underset{\sim}{x},t\right) + h_{conv}\mathrm{T}_{\mathrm{bulk}}\left(\underset{\sim}{x},t\right)\right]_\Gamma \text{ in } H^{-1/2}(\Gamma) \ . \quad (1)$$

Where: $H^{\pm 1/2}(\Gamma)$, $H^{\pm 1}(\Omega)$ being the usual Sobolev spaces; $L^2(\Omega)$ being the space of the square integrable function; $\underset{\sim}{\nabla}\cdot(\circ)$ denote the divergent operator; $\underset{\sim}{\nabla}(\circ)$ denote the gradient operator; $D = D(\mathrm{T})$ the thermal conductivity; $\rho = \rho(\mathrm{T})$ the density; $c_p = c_p(\mathrm{T})$ the specific heat at constant pressure; h_{conv} the convection heat transfer coefficient; σ the product between emissivity and shape factor; and $\underset{\sim}{\mathrm{n}}$ the unit normal vector on Γ outward to Ω.

INTEGRATION ON TIME

For each $\left[t^{\mathrm{K}}, t^{\mathrm{K+1}}\right]$, $t^{\mathrm{K}} = 0$, $t^{\mathrm{K+1}} = t^{\mathrm{K}} + \left(\Delta t\right)^{\mathrm{K}}$, we estimate the integrals as:

$$\int_{t_K}^{t_{K+1}} -\nabla\cdot\left[D\nabla T\right]dt \approx -(\Delta t)_K\ \nabla\cdot\left[D^{K+1}\nabla T^{K+1}\right]; \quad (2)$$

$$\int_{t_K}^{t_{K+1}} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}dt \approx \rho^{K+1}c_p^{K+1}\left(T^{K+1}-T^K\right); \quad (3)$$

$$\int_{t_K}^{t_{K+1}} \left[D\nabla T\cdot n\big|_\Gamma + \left(\sigma T^4 + h_{conv}\,T\right)\right]dt \approx$$

$$(\Delta t)_K\left[D^{K+1}\nabla T^{K+1}\cdot n\big|_\Gamma + \sigma\left(T^{K+1}\right)^4 + h_{conv}\,T^K\right]; \quad (4)$$

$$\int_{t_K}^{t_{K+1}} f\,dt \approx f\left(x,\frac{t^{K+1}+t^K}{2}\right)(\Delta t)_K; \quad (5)$$

$$\int_{t_K}^{t_{K+1}} \left[\sigma T_{ref}^4\left(x,t\right) + h_{conv}\,T_{bulk}\left(x,t\right)\right]dt \approx$$

$$\left[\sigma T_{ref}^4\left(x,\frac{t^{K+1}+t^K}{2}\right) + h_{conv}\,T_{bulk}\left(x,\frac{t^{K+1}+t^K}{2}\right)\right]_\Gamma; \quad (6)$$

and for each m = 0,1,... we have the linearization:

$$\left(T^{m+1}\right)^4 \approx 4\left(T^m\right)^3 T^{m+1} - 3\left(T^m\right)^4, \quad (7)$$

and for each time step [t^K, t^{K+1}] fixed, (k=0, 1, ...), we have $T^K = T_0$ if K=0, (8)

and have the problem given by the iterative scheme :

$T^0 = T^K$,

and for m=0, 1, ... ,

$$-(\Delta t)_K\,\nabla\cdot\left[D^m\nabla T^{m+1}\right] + \rho^m c_p^m\,T^{m+1} =$$

$$\rho^m c_p^m\,T^K + f\left(x,\frac{t^{K+1}+t^K}{2}\right)(\Delta t)_K \text{ in } H^{-1}(\Omega),$$

$$T^{K+1} = \lim_{m\to\infty} T^m,$$

$$D^m\nabla T^{m+1}\cdot n\big|_\Gamma + \left[4\sigma\left(T^m\right)^3 + h_{conv}\right]T^m\big|_\Gamma =$$

$$\left[4\sigma\left(T^m\right)^4 + \sigma T_{ref}^4\left(x,\frac{t^K+t^{K+1}}{2}\right)\right]_\Gamma +$$

$$\left[h_{conv}\,T_{bulk}\left(x,\frac{t^K+t^{K+1}}{2}\right)\right]_\Gamma \text{ in } H^{-1/2}(\Gamma). \quad (9)$$

with D^m, ρ^m, c_p^m being estimated on the temperature T^m.

VARIATIONAL FORMULATION

The variational formulation associated to the problem given by (9), consists: for each time step [t^K, t^{K+1}] fixed, (k=0, 1, ...), $T^K = T_0(x)$ if K= 0, and have the iterative scheme:
$T^0 = T^K$ and for (m=0, 1, 2, ...), $T^{m+1} \in H^1(\Omega)$, satisfying the following variational equations:

$$\int_\Omega \left[D^m\nabla T^{m+1}\cdot\nabla\eta + \rho^m c_p^m T^{m+1}\eta\right]d\Omega +$$

$$\int_\Gamma \left[4\sigma\left(T^m\right)^3 + h_{conv}\right]T^{m+1}\eta\,d\Gamma =$$

$$\int_\Omega \left[\rho^m c_p^m\,T^K + f\left(x,\frac{t^K+t^{K+1}}{2}\right)(\Delta t)_K\right]\eta\,d\Omega +$$

$$\int_\Gamma \left[4\sigma\left(T^m\right)^4 + \sigma T_{ref}^4\left(x,\frac{t^K+t^{K+1}}{2}\right)\right]\eta\,d\Gamma +$$

$$\int_\Gamma \left[h_{conv}\,T_{bulk}\left(x,\frac{t^K+t^{K+1}}{2}\right)\right]\eta\,d\Gamma$$

$$\forall\eta\in H^1(\Omega),\ T^{K+1} = \lim_{m\to\infty} T^m, \quad (10)$$

FINITE ELEMENT FORMULATION (The *GGLS* Method)

Consider a partition of finite element on the domain Ω so that:

$$\Omega_e \cap \Omega_{e'} = \varnothing, \text{ if } e \neq e$$

$$\bigcup_e \left(\Omega_e \cup \Gamma_e\right) = \Omega \cup \Gamma \quad (11)$$

Γ_e being the boundary of Ω_e and $\varnothing$ being empty set.

Let $P^i(\Omega_e)$ be given by:

$$P^i(\Omega_e) = \left\{\begin{array}{l}\Psi:\Omega_e \mapsto \Re, \Psi \text{ is a polinomial} \\ \text{of degree not greater than } i,\ i \geq 1\end{array}\right\}$$

and the space:

$$H^{i,h} = \left\{ \Psi \in H^1(\Omega), \Psi_e \in P^i(\Omega_e) \right\},$$

Ψ_e being the restriction of Ψ in Ω_e

The *GGLS* method presented in Franca and do Carmo (1989a) consists:

For each time step [t^K, t^{K+1}] fixed, (k=0, 1, 2, ...) , with $T_h^K = T_0(x)$ if K=0, find T_h^{m+1} belongs to $H^{i,h}(\Omega)$ (m=0,1,2, ...) satisfying the variational equation:

$$\int_\Omega \left[D_h^m \underset{\sim}{\nabla} T_h^{m+1} \cdot \underset{\sim}{\nabla} \eta_h + \rho_h^m c_p^{m,h} T_h^{m+1} \eta_h \right] d\Omega +$$

$$\int_\Gamma \left[4\sigma \left(T_h^m\right)^3 + h_{conv} \right] T_h^{m+1} \eta_h \, d\Gamma +$$

$$\sum_e \int_{\Omega_e} \underset{\sim}{\nabla} \left[-(\Delta t)_K \underset{\sim}{\nabla} \cdot \left(D_h^m \underset{\sim}{\nabla} T_h^{m+1} \right) + \rho_h^m c_p^{m,h} T_h^{m+1} \right] \tau_e \underset{\sim}{\nabla} \left[-(\Delta t)_K \underset{\sim}{\nabla} \cdot \left(D_h^m \underset{\sim}{\nabla} \eta_h \right) + \rho_h^m c_p^{m,h} \eta_h \right] d\Omega +$$

$$\int_\Omega \left[\rho_h^m c_p^{m,h} T_h^K + f\left(\underset{\sim}{x}, \frac{t^K + t^{K+1}}{2} \right) (\Delta t)_K \right] \eta_h \, d\Omega +$$

$$\int_\Gamma \left[4\sigma \left(T_h^m\right)^4 + \sigma T_{ref}^4 \left(\underset{\sim}{x}, \frac{t^K + t^{K+1}}{2} \right) \right] \eta_h \, d\Gamma +$$

$$\sum_e \int_{\Omega_e} \underset{\sim}{\nabla} \left[\rho_h^m c_p^{m,h} T_h^K + f\left(\underset{\sim}{x}, \frac{t^K + t^{K+1}}{2} \right) (\Delta t)_K \right] \tau_e \underset{\sim}{\nabla} \left[-(\Delta t)_K \underset{\sim}{\nabla} \cdot \left(D_h^m \underset{\sim}{\nabla} \eta_h \right) + \rho_h^m c_p^{m,h} \left(T_h^m\right) \eta_h \right] d\Omega$$

, $\forall \eta_h \in H^{i,h}(\Omega)$, $T_h^0 = T_h^K$, $T_h^{K+1} = \lim_{m \to \infty} T_h^m$, with D_h^m, ρ_h^m, $c_p^{m,h}$ being estimated on the temperature T_h^m, and convergence is assumed when

$$\left| (T_h^{m+1} - T_h^m) / T_h^{m+1} \right| \le 0.001$$

for each time step [t^K, t^{K+1}] fixed. (12)

and by Franca and do Carmo (1989a), the parameter τ_e is given by:

$$\tau_e = \frac{h_e^2 \xi_e}{6 \left\langle \rho_h^m c_p^{m,h} \right\rangle}, \quad (13)$$

$$h_e = \left[\mathrm{Vol}(\Omega_e) \right]^{2/3}, \quad (14)$$

$$\xi_e = \begin{cases} 1, if \ \alpha_e \ge 8 \\ 0.064\alpha_e + 0.49, \ 1 \le \alpha_e \le 8 \\ 0, \ \alpha_e < 1 \end{cases} \quad (15)$$

$$\alpha_e = \frac{\left\langle \rho_h^m c_p^{m,h} \right\rangle h_e^2}{6 \left\langle D_h^m \right\rangle (\Delta t)_K}, \quad (16)$$

$$\left\langle \rho_h^m c_p^{m,h} \right\rangle = \frac{\int_{\Omega_e} \rho_h^m c_p^{m,h} \, d\Omega}{\mathrm{Vol}(\Omega_e)}, \quad (17)$$

$$\left\langle D_h^m \right\rangle = \frac{\int_{\Omega_e} D_h^m \, d\Omega}{\mathrm{Vol}(\Omega_e)}, \quad (18)$$

$\mathrm{Vol}(\Omega_e)$ denoting the volume of Ω_e.

We note that if $\tau_e = 0 \ \forall e$, then we have the Galerkin method.

The same criterion of convergence was assumed for the Galerkin method. We note that the sucess of the GGLS method, for this problem, can be attributed to the control of derivatives introduced by pieces at elements level given (12). The theorical analysis of the GGLS method can be found in (1989a).

NUMERICAL RESULTS

In order to demonstrate the necessity of GGLS method, we present one numerical example.

We use a regular mesh 8x6x6 three-linears elements with Gauss integration 2x2x2.

We simulated the cooling of a block of steel slabs with 10.0m lenght, 1.8 width and 3.0 height. The initial temperature $T_0 = 800^0$C, $\sigma = 0.37$ and $h_{conv} = 5e04$ W/m^{2}K. The results were presented at line of highest gradient.

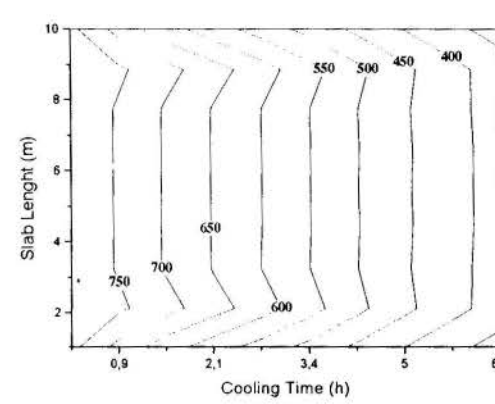


Figure 1 (Galerkin Method)

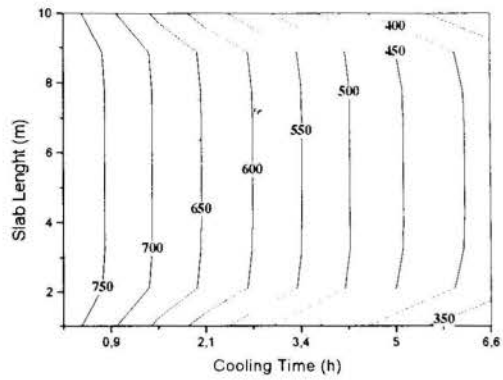


Figure 2 (*GGLS* Method).

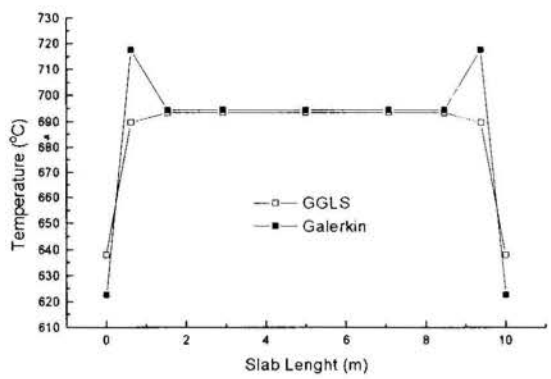


Figure 3 (Cooling Time = 1.5h).

As we can see on the graphics shown above, the Galerkin method gives approximated solution with spurious oscillations at high gradient areas.

CONCLUSIONS

The numerical experiments presented in this work demonstrate that the problem of condution for materials in high temperature cannot be analysed by Galerkin method if not use a fine mesh.

The *GGLS* method shown high numerical performance as is forseen in Franca and do Carmo (1989a). Therefore, if gradient of temperature is the variable of interest, as in thermal stress, the *GGLS* method is advisable.

REFERENCES

Franca, L. P. and do Carmo, E. G. D., 1989a, "The Galerkin Gradient Least-Squares Method", *Computer Method in Applied Mechanics an Engineering*, Vol. 74, pp 41-54.

Franca, L. P. and do Carmo, E. G. D., 1989b, "Strong source heat transfer simulations based on a Galerkin Gradient Least-Squares Method", *Proceedings, 6th International Conference on Numerical Methods in Thermal Problems*, R.W. Lewis and K. Morgan, ed., Institute of Numerical Methods in Engineering, Swansea, U.K., Vol. 6, pp 160-169.

APROXIMAÇÕES DE PROBLEMAS DE CONVECÇÃO DE CALOR VIA METODOLOGIAS ESTABILIZADAS

Sérgio Frey
Dpto. de Engenharia Mecânica
Universidade Federal Fluminense
Rua Passo da Pátria 156, 24210-240 - Niterói - RJ - Brazil

RESUMO

Neste artigo introduzimos um método estabilizado de elementos finitos para convecção de calor nos escoamentos de Navier-Stokes. Construído de maneira a herdar as características de estabilidade dos métodos estabilizados introduzidos para os modelos de Stokes e advecção-difusão, o método proposto não necessita atender à condição de Babuška-Brezzi e permanece estável mesmo em escoamentos fortemente advectivos. A característica evolutiva e não-linear do modelo são tratadas por um algoritmo preditor/multi-corretor.

DINÂMICA DOS FLUIDOS

O escoamento dos fluidos é um fenômeno físico que pode ser representado por uma *transformação contínua* no espaço euclidiano, parametrizada pelo tempo $t \in [0, \infty)$,

$$\chi : \mathcal{B} \times \mathbf{R}^+ \to \mathcal{E} \tag{1}$$

onde $\mathcal{B}$ denota um fluido genérico, χ uma transformação de classe $\mathcal{C}^3$ referida como seu *movimento* e $t = 0$ um instante inicial arbitrário.

Durante o movimento do fluido, suas interações com o exterior são descritas pelas forças nele atuantes. Classicamente, consideramos as forças de contato entre suas partes, entre seu contorno e o exterior, e as forças volumétricas. Para avaliar as forças de contato, empregamos a **hipótese de Cauchy**: *Numa superfície fechada $\mathcal{S}$ existe uma distribuição de vetores tensão* $\mathbf{t}$ *cuja resultante é equivalente às forças exercidas pelo exterior da superfície $\mathcal{S}$ em seu interior.* Supomos ainda que $\mathbf{t}$ depende apenas da posição e da orientação do elemento de superfície da, $\mathbf{t} = \mathbf{t}(\mathbf{n}; \mathbf{x}, t)$, com $\mathbf{n}$ denotando a normal exterior à $\mathcal{S}$. Essas forças se relacionam com o movimento do fluido através dos axiomas de Euler,

I. Princípio da Conservação do Momentum Linear. *A taxa de variação do momentum linear num volume de fluido Ω é igual à força total nele aplicada,*

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)d\Omega = \int_\Omega \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)d\Omega + \int_\Gamma \mathbf{t}(\mathbf{n}; \mathbf{x}, t)d\Gamma \tag{2}$$

onde Γ denota a fronteira do volume Ω.

II. Princípio da Conservação do Momentum Angular. *A taxa de variação do momentum angular num volume de fluido Ω é igual ao torque total nele aplicado,*

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)d\Omega = \int_\Omega \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{f}(\mathbf{x}, t)d\Omega + \int_\Gamma \mathbf{r}(\mathbf{x}) \times \mathbf{t}(\mathbf{n}; \mathbf{x}, t)d\Gamma \tag{3}$$

com $\mathbf{r}$ representando o vetor posição.

Por fim, enunciaremos o Teorema de Cauchy (Truesdell and Toupin, 1960), o qual asserta a linearidade de $\mathbf{t}(\mathbf{n})$ e estabelece a *equação de movimento* dos fluidos.

Teorema 1. *Seja $(\mathbf{t}, \mathbf{f})$ um sistema de forças de um corpo em movimento. A condição necessária e suficiente para que as leis de conservação de momentum sejam satisfeitas é a existência de um campo tensorial simétrico $\boldsymbol{\sigma}$ - chamado tensor de Cauchy - tal que $\mathbf{t}(\mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$, satisfazendo à equação*

$$\rho(\mathbf{x}, t)\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \tag{4}$$

Equações de Navier-Stokes. Os axiomas de Euler, mesmo válidos para maioria dos corpos, são insuficientes para caracterizá-los, por serem incapazes de distinguir os diferentes comportamentos materiais. Será necessário, portanto, introduzir as chamadas *hipóteses constitutivas.*

O fenômeno de atrito é manifesto nos fluidos através de suas forças cizalhantes, as quais retardam o movimento relativo de suas partículas. Uma boa medida deste movimento é fornecida pelo tensor $\nabla\mathbf{u}$, sugerindo equações constitutivas da forma

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = -p(\mathbf{x}, t)\mathbf{I} + \mathbf{C}(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) \tag{5}$$

onde $\mathbf{C}(\cdot)$ é conhecida como *função resposta* do fluido.

Os materiais caracterizados por relações do tipo (5) são denominados **fluidos newtonianos**. Para a

classe dos *fluidos newtonianos compressíveis*, a função resposta (cf. Landau e Lifchitz, 1971) é dada pela expressão

$$\mathbf{C}(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t)) = \mu(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t) + \nabla\mathbf{u}^T(\mathbf{x},t)) + \left(\zeta - \frac{2}{3}\mu\right)(\nabla\cdot\mathbf{u}(\mathbf{x},t))\,\mathbf{I} \tag{6}$$

onde μ e ζ são, respectivamente, o primeiro e segundo coeficientes de viscosidade.

Muitos escoamentos, entretanto, apresentam uma variação muito pequena em sua massa específica, os chamados *fluidos incompressíveis*. Segundo Gurtin (1981), a resposta desses fluidos pode ser caracterizada por uma única constante: sua *viscosidade*.

Teorema 2. *A condição necessária e suficiente para que a resposta de um fluido newtoniano incompressível seja independente do observador é que* $\mathbf{C}$ *seja da forma*

$$\mathbf{C}(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t)) = 2\mu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t)) \qquad \nabla\mathbf{u}\in Lin_0 \tag{7}$$

onde $Lin_0 = \{\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t)\in Lin | tr(\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t)) = 0\}$ *e* μ *a viscosidade absoluta do fluido.*

Considere agora a equação de movimento e as hipóteses constitutivas introduzidas anteriormente. Substituindo as eqs.(5),(6) em (4), obtemos a *equação de movimento dos fluidos newtonianos*,

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x},t)\Big(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}(\mathbf{x},t) + [\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t)]\mathbf{u}(\mathbf{x},t)\Big) + \nabla p(\mathbf{x},t)\\ - \mu\Delta\mathbf{u}(\mathbf{x},t) - \mu\nabla\cdot\nabla\mathbf{u}^T(\mathbf{x},t)\\ - \nabla\cdot\Big(\big(\zeta - \frac{2}{3}\mu\big)(\nabla\cdot\mathbf{u}(\mathbf{x},t))\,\mathbf{I}\Big) = \mathbf{f}(\mathbf{x},t)\end{aligned} \tag{8}$$

Considerando constantes os coeficientes μ e ζ, usando que $\nabla\cdot\nabla\mathbf{u}^T = \nabla(\nabla\cdot\mathbf{u})$ e impondo $\nabla\cdot\mathbf{u} = 0$ à eq.(8), obtemos as chamadas *equações de Navier-Stokes incompressível*,

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x},t)(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t}(\mathbf{x},t) + [\nabla\mathbf{u}(\mathbf{x},t)]\mathbf{u}(\mathbf{x},t)) + \nabla p(\mathbf{x},t)\\ - 2\mu\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t)) = \mathbf{f}(\mathbf{x},t)\end{aligned} \tag{9}$$

1ª Lei da Termodinâmica. Da Teoria Termodinâmica, sabemos que a energia ao longo de um escoamento pode assumir diferentes formas - térmica, eletromagnética, química - podendo todas elas se transformarem no seu decorrer, sendo, portanto, imperativo enuciarmos uma lei de conservação de energia - a *1ª Lei da Termodinâmica* (Van Wylen e Sonntag, 1978),

$$\frac{d}{dt}\mathcal{K}(\Omega) + \frac{d}{dt}\mathcal{U}(\Omega) = \mathcal{H}(\Omega) + \mathcal{P}(\Omega) \tag{10}$$

onde $\mathcal{K}(\Omega)$ é a energia cinética de um volume Ω do fluido, $\mathcal{U}(\Omega)$ sua energia interna, $\mathcal{H}(\Omega)$ a taxa do calor por ele trocado e $\mathcal{P}(\Omega)$ a potência mecânica nele despendida, definida pelo *Princípio das Potências Virtuais* (Truesdell e Toupin, 1960),

$$\mathcal{P}(\Omega) = \frac{d}{dt}\mathcal{K}(\Omega) + \int_\Omega \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x},t):\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t))d\Omega$$

Substituindo a expressão acima de $\mathcal{P}(\Omega)$ na eq.(10), obteremos a equação de conservação da energia térmica,

$$\frac{d}{dt}\mathcal{U}(\Omega) = \mathcal{H}(\Omega) + \int_\Omega \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x},t):\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t))d\Omega \tag{11}$$

Supondo a energia interna de um fluido uma propriedade aditiva, temos que

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int_\Omega \rho(\mathbf{x},t)\varepsilon(\mathbf{x},t)d\Omega = \int_\Omega \rho(\mathbf{x},t)r(\mathbf{x},t)d\Omega\\ - \int_\Gamma h(\mathbf{x},t)d\Gamma + \int_\Omega \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x},t):\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t))d\Omega\end{aligned} \tag{12}$$

onde r denota uma fonte de calor por unidade de massa e h o fluxo de calor na fronteira Γ. Aplicando o Teorema de Transporte de Reynolds (Gurtin, 1981) e supondo a existência de um vetor fluxo de calor, $h = -\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}$,

$$\begin{aligned}\int_\Omega \rho(\mathbf{x},t)\dot{\varepsilon}(\mathbf{x},t)d\Omega = -\int_\Gamma \mathbf{q}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{n}(\mathbf{x})d\Gamma\\ + \int_\Omega (\rho(\mathbf{x},t)r(\mathbf{x},t) + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x},t):\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t))d\Omega\end{aligned} \tag{13}$$

Aplicando o teorema da divergência e o teorema da localização (Gurtin, 1981), chegamos a forma forte da *equação de conservação da energia térmica*,

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{x},t)\dot{\varepsilon}(\mathbf{x},t) = -\nabla\cdot\mathbf{q}(\mathbf{x},t) + \rho(\mathbf{x},t)r(\mathbf{x},t)\\ + \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x},t):\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}(\mathbf{x},t))\end{aligned} \tag{14}$$

O modelo da advecção-difusão. A eq.(14) necessita ainda de hipóteses constitutivas. Negligenciando a troca de calor por radiação, o fluxo de calor em um fluido é dado pela *Lei de Fourier*: *O fluxo de calor* $\mathbf{q}$, *por unidade de área e tempo, é proporcional ao gradiente de temperatura* $\nabla\theta$. Entretanto, na prática de Engenharia, são comuns as situações anisotrópicas. Nestes casos, generalizamos a Lei acima supondo $\mathbf{q}$ linearmente dependente de $\nabla\theta$ - a chamada *Lei de Fourier Generalizada* (Kays e Crawford, 1980),

$$\mathbf{q}(\mathbf{x},t) = -\mathbf{K}\,\nabla\theta(\mathbf{x},t) \tag{15}$$

onde $\mathbf{K} = \mathrm{K}_{\alpha\beta}\,e_\alpha\otimes e_\beta$ é denotado por *tensor condutividade térmica* do fluido.

A eq.(14) pode ser ainda desenvolvida impondo considerações termodinâmicas. O estado termodinâmico de um fluido é determinado por duas propriedades independentes (Van Wylen e Sonntag, 1978). Logo, podemos escrever sua energia interna e entalpia

como $\varepsilon(v,\theta)$ e $\hbar(p,\theta)$. Das definições de *calor específico a volume e pressão constante*, c_v e c_p respectivamente,

$$d\varepsilon = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial v}\right)_\theta dv + c_v d\theta \quad , \quad d\hbar = \left(\frac{\partial \hbar}{\partial p}\right)_\theta dp + c_p d\theta \tag{16}$$

teremos, para os escoamentos isobáricos incompressíveis, que

$$d\varepsilon = d\hbar = c d\theta$$

com $c = c_v = c_p$ denotado simplesmente por *calor específico* do fluido. Mesmo nos escoamentos onde a pressão varia, a diferença $c_p - c_v$ pode ainda ser desprezada para os fluidos incompressíveis (Van Wylen e Sonntag, 1978). Introduzindo a relação acima na eq.(14) e desprezando seus termos dissipativos,

$$\rho(\mathbf{x}.t)c\dot{\theta}(\mathbf{x}.t) + \nabla\cdot\mathbf{q}(\mathbf{x}.t) = \rho(\mathbf{x}.t)r(\mathbf{x}.t) \tag{17}$$

Aplicando a lei constitutiva (15) à eq.(17), chegamos a *equação da advecção-difusão*,

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}(\mathbf{x},t) + \mathbf{U}(\mathbf{x},t)\cdot\nabla\theta(\mathbf{x},t) - \nabla\cdot(\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{x},t)\nabla\theta(\mathbf{x},t)) = r(\mathbf{x},t) \tag{18}$$

onde $\mathbf{U}(\mathbf{x},t)$ é o campo advectivo e a *difusividade térmica* do fluido dada por $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{K}/\rho c$.

MODELAGEM NUMÉRICA

A partir das equações de conservação de momentum e de energia, eqs.(9) e (18) respectivamente, empregando as adimensionalizações usuais em Mecânica (Kays e Crawford, 1980 e Landau e Lifchitz, 1971), obtemos o problema de contorno que governa a convecção de calor nos escoamentos incompressíveis,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla\mathbf{u}]\mathbf{u} - 2\nu\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}) + \nabla p &= \mathbf{f}, \quad \Omega\times(0,T)\\
\frac{\partial\theta}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\theta - \kappa\Delta\theta &= r, \quad \Omega\times(0,T)\\
\nabla\cdot\mathbf{u} &= 0, \quad \Omega\times(0,T)\\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_g, \quad \Gamma_g\times(0,T)\\
\theta &= \theta_g, \quad \Gamma_g\times(0,T)\\
\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n} &= \boldsymbol{\sigma}_h, \quad \Gamma_h\times(0,T)\\
\mathbf{q}\cdot\mathbf{n} &= q_h, \quad \Gamma_h\times(0,T)\\
\mathbf{u} &= \mathbf{u}_0, \quad \Omega \text{ com } t=0\\
\theta &= \theta_0, \quad \Omega \text{ com } t=0
\end{aligned} \tag{19}$$

onde $\mathbf{u}$ é a velocidade do fluido, p sua pressão, ν sua viscosidade dinâmica, θ sua temperatura, $\boldsymbol{\sigma}$ o tensor de Cauchy (eqs.(5),(7)), $\mathbf{q}$ o vetor fluxo de calor (eq.(15)), $\mathbf{f}$ a força de corpo do escoamento, r sua fonte térmica, e ν^{-1} e κ^{-1} representam seus números de Reynolds e Péclet (Kays e Crawford, 1980) e, finalmente, Γ_g e Γ_h as partes da fronteira Ω nas quais são impostas, respectivamente, as condições de Dirichlet e Neumman.

Um método estabilizado para convecção de calor. Na construção da aproximação das eqs.(19), empregaremos os subespaços de elementos finitos usuais em *Dinâmica dos Fluidos*,

$$\mathbf{V}_h = \{\mathbf{v}\in H_0^1(\Omega)^N \mid \mathbf{v}_{|\mathbf{x}\in K}\in Q_k(K)^N,\ K\in\mathcal{C}_h\} \tag{20}$$

$$P_h = \{p\in\mathcal{C}^0(\Omega)\cap L_0^2(\Omega) \mid p_{|K}\in Q_l(K),\ K\in\mathcal{C}_h\} \tag{21}$$

$$W_h = \{\phi\in H_0^1(\Omega) \mid \phi_{|\mathbf{x}\in K}\in Q_m(K),\ K\in\mathcal{C}_h\} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{V}_h^g = \{&\mathbf{v}(\cdot,t)\in H^1(\Omega)^N,\ t\in[0,T] \mid \mathbf{v}_{|\mathbf{x}\in K}\\ &\in Q_k(K)^N, K\in\mathcal{C}_h,\ \mathbf{v}(\cdot,t)=\mathbf{u}_g \text{ sobre } \Gamma_\mathbf{g}\}\end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned}W_h^g = \{&\phi(\cdot,t)\in H^1(\Omega),\ t\in[0,T] \mid \phi_{|\mathbf{x}\in K}\in Q_m(K),\\ &K\in\mathcal{C}_h,\ \phi(\cdot,t)=\theta_g \text{ sobre } \Gamma_\mathbf{g}\}\end{aligned} \tag{24}$$

onde Q_k, Q_l e Q_m denotam, respectivamente, espaços polinomiais de grau k, l e m.

A partir das definições (20)-(24) e baseado nos métodos estabilizados já introduzidos para problemas de fluidos (Brooks e Hughes, 1980, Franca e Frey, 1992, Franca et al., 1992, Hughes e Franca, 1987 e Sampaio, 1991), podemos introduzir o seguinte método estabilizado para aproximar o sistema (19): *Achar a tripla* $(\mathbf{u}_h, p_h, \theta_h)\in\mathbf{V}_h^g\times P_h\times W_h^g$ *tal que*

$$B(\mathbf{u}_h,p_h,\theta_h;\mathbf{v},q,\phi) = F(\mathbf{v},q,\phi), \quad (\mathbf{v},q,\phi)\in\mathbf{V}_h\times P_h\times W_h \tag{25}$$

com

$$\begin{aligned}
B(\mathbf{u},p,\theta;\mathbf{v},q,\phi) &= \left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla\mathbf{u}]\mathbf{u},\mathbf{v}\right) - (\nabla\cdot\mathbf{v},p)\\
&+ (2\nu\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}),\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})) - (\nabla\cdot\mathbf{u},q)\\
&+ \sum_{K\in\mathcal{C}_h}\Big(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + [\nabla\mathbf{u}]\mathbf{u} + \nabla p - 2\nu\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}),\\
&\qquad \tau_\mathbf{v}(\mathrm{Re}_K)([\nabla\mathbf{v}]\mathbf{u} - \nabla q - 2\nu\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}))\Big)_K\\
&+ \left(\frac{\partial\theta}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\theta,\phi\right) + (\kappa\nabla\theta,\nabla\phi) + (\nabla\cdot\mathbf{u},\delta\nabla\cdot\mathbf{v})\\
&+ \sum_{K\in\mathcal{C}_h}\Big(\frac{\partial\theta}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla\theta - \kappa\Delta\theta,\\
&\qquad \tau_\phi(\mathrm{Pe}_K)(\mathbf{u}\cdot\nabla\phi - \kappa\Delta\phi)\Big)_K
\end{aligned} \tag{26}$$

e

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{v},q,\phi) &= (\mathbf{f},\mathbf{v}) + (\boldsymbol{\sigma}_h,\mathbf{v})_{\Gamma_h} + (r,\phi) + (q_h,\phi)_{\Gamma_h}\\
&+ \sum_{K\in\mathcal{C}_h}\Big(\mathbf{f},\tau_\mathbf{v}(\mathrm{Re}_K)([\nabla\mathbf{v}]\mathbf{u} - \nabla q - 2\nu\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}))\Big)_K\\
&+ \sum_{K\in\mathcal{C}_h}(r,\tau_\phi(\mathrm{Pe}_K)(\mathbf{u}\cdot\nabla\phi - \kappa\Delta\phi))_K
\end{aligned} \tag{27}$$

onde os parâmetros de estabilidade $\tau_{\mathbf{v}}$, τ_ϕ e δ são definidos por:

$$\tau_i(X_i) = \frac{h_K}{2|\mathbf{u}|_p}\xi(X_i), \quad \text{com } X_{\mathbf{v}} = \mathrm{Re}_K\ ,\ X_\phi = \mathrm{Pe}_K \tag{28}$$

$$\xi(X_i) = \begin{cases} X_i & , 0 \le X_i \le 1 \\ 1 & , X_i \ge 1 \end{cases} \tag{29}$$

$$\mathrm{Re}_K = \frac{m_k|\mathbf{u}|_p h_K}{4\nu} \quad , \quad \mathrm{Pe}_K = \frac{m_k|\mathbf{u}|_p h_K}{2\kappa} \tag{30}$$

$$m_k^i = \min\left\{\frac{1}{3},\ 2\mathbf{C}_k^i\right\} \quad , \quad \text{com } i = \mathbf{v}, \phi \tag{31}$$

$$C_k^{\mathbf{v}} \sum_{K\in\mathcal{C}_h} h_K^2\|\nabla\cdot\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})\|_{0,K}^2 \le \|\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})\|_0^2 \qquad \mathbf{v}\in\mathbf{V}_h \tag{32}$$

$$C_k^{\phi} \sum_{K\in\mathcal{C}_h} h_K^2\|\Delta\phi\|_{0,K}^2 \le \|\nabla\phi\|_0^2 \qquad \phi\in W_h \tag{33}$$

$$\delta = \lambda|\mathbf{u}(\mathbf{x})|_p h_K \xi(\mathrm{Re}_K(\mathbf{x})) \tag{34}$$

$\lambda \ge 1$ e $|\cdot|_p$ denotando a norma-p do $\mathbf{R}^N$.

Comentários. (1) (*Teorema de Brezzi*) Fazendo os parâmetros de estabilidade $\tau_{\mathbf{v}}$, τ_ϕ e δ iguais a zero nas eqs.(25)-(27), obtemos a aproximação de Galerkin clássica para problemas de convecção de calor, a qual infelizmente não apresenta bons resultados para fluidos. Sua estabilidade, no contexto linear do problema Stokes, é governada pelo Teorema de Brezzi (Ciarlet, 1978), o qual, de modo a garantir unicidade da solução $(\mathbf{u}, p) \in \mathbf{V}_h \times P_h$, impõe as seguintes restrições sobre os subespaços de velocidade e pressão,

I. ($\mathbf{K}_h^0$-*Elipcidade*), *Existe uma constante* $C_1 > 0$ *tal que,*

$$|a(\mathbf{v},\mathbf{v})| \ge C_1\|\mathbf{v}\|_1, \qquad \mathbf{v}\in\mathbf{K}_h^0$$

com o subespaço $\mathbf{K}_h^0$ *dado por*

$$\mathbf{K}_h^0 = \{\mathbf{v}\in\mathbf{V}_h | \int_\Omega q\nabla\cdot\mathbf{v} = 0, \quad q\in P_h\}$$

II. (*Babuška-Brezzi*) *Existe uma constante* $C_2 > 0$ *tal que,*

$$\sup_{\mathbf{v}\in\mathbf{V}_h} \frac{|\int_\Omega q\nabla\cdot\mathbf{v}|}{\|\mathbf{v}\|_1} \ge C_2\|q\|_0, \qquad q\in P_h\ .$$

Visto que em geral $\mathbf{K}_h^0 \not\subset \mathbf{K}^0$, apenas um número limitado de combinações de elementos finitos irá satisfêlas, criando assim uma séria limitação ao método de Galerkin clássico. No mais, combinações de elementos computacionalmente atraentes como as de igual-ordem, ficam de ante-mão descartadas por não satisfazerem as condições acima.

(2) (*Instabilidade de Galerkin*) A instabilidade da formulação de Galerkin em regimes de escoamento advectivos-dominados, pode ser entendida através de sua coercividade de sua forma trilinear B. Tomando $(\mathbf{v}, q, \phi) = (\mathbf{u}, -p, \theta)$ e $\tau_{\mathbf{v}}, \tau_\phi, \delta = 0$ na definição (26) e selecionando $\mathbf{v}\in H_0^1(\Omega)^N$ e $\phi\in H_0^1(\Omega)$, teremos que

$$\begin{aligned} B(\mathbf{v},q,\phi;\mathbf{u},-q,\phi) &\ge 2\nu\|\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v})\|_0^2 + \kappa\|\nabla\phi\|_0^2 \\ &(\mathbf{v},q,\phi)\in\mathbf{V}_h\times P_h\times\mathbf{W}_h \end{aligned} \tag{35}$$

Logo, nos escoamentos onde $\nu, \kappa \to 0$, teremos aproximações de Galerkin não-coercivas e, consequentemente, contaminadas por oscilações espúrias.

(3) Modificamos as expressões usuais dos números de Reynolds e Péclet de malha (Johnson, 1987) com a inclusão da constante m_k nas eqs.(30), de modo que estes números também levem em consideração o grau das interpolações empregadas. Com isto, as regiões advectivas-dominadas do escoamento ficam caracterizadas por $\mathrm{Re}_K, \mathrm{Pe}_K > 1$ e as difusivas-dominadas por $\mathrm{Re}_K, \mathrm{Pe}_K < 1$, independente do elemento considerado.

Algoritmo de Integração. A discretização das eqs.(25)-(27) é obtida pela expansão das funções $\{\mathbf{u}_h, p_h, \theta_h\}$ e $\{\mathbf{v}, q, \phi\}$ em suas respectivas funções - base, gerando o sistema de equações semi-discretas,

$$\begin{aligned} [\mathbf{M}+\mathbf{M}_\tau^{\mathbf{v}}]\mathbf{a} + \mathbf{N}(\mathbf{u}) + \mathbf{N}_\tau^{\mathbf{v}}(\mathbf{u}) + [\mathbf{K}+\mathbf{K}_\tau^{\mathbf{v}}+\mathbf{K}_\delta^{\mathbf{v}}]\mathbf{u} \\ +[\mathbf{G}+\mathbf{G}_\tau^{\mathbf{v}}]\mathbf{p} = \mathbf{F}+\mathbf{F}_\tau \\ [\mathbf{A}+\mathbf{A}_\tau^{\phi}]\boldsymbol{\theta}_{,\mathbf{t}} + [\mathbf{C}+\mathbf{C}_\tau^{\phi}+\mathbf{D}+\mathbf{D}_\tau^{\phi}]\boldsymbol{\theta} = \mathbf{Q}+\mathbf{Q}_\tau^{\phi} \\ [\mathbf{M}_\tau^q]\mathbf{a} + \mathbf{N}_\tau^q(\mathbf{u}) + [\mathbf{G}^T+\mathbf{K}_\tau^q]\mathbf{u} + [\mathbf{G}_\tau^q]\mathbf{p} = \mathbf{E}_\tau \end{aligned} \tag{36}$$

onde $\mathbf{u}$, $\mathbf{p}$, $\boldsymbol{\theta}$, $\mathbf{a}$ e $\theta_{,\mathbf{t}}$ são os vetores dos graus-de-liberdade de $\mathbf{u}_h$, p_h, $\boldsymbol{\theta}_h$, $\partial\mathbf{u}_h/\partial t$ e $\partial\boldsymbol{\theta}_h/\partial t$, respectivamente. As matrizes $[\mathbf{M}]$, $[\mathbf{K}]$ e $[\mathbf{G}]$ são originadas pelos termos transiente, viscoso e bárico da equação de momentum de (25)-(27); já $[\mathbf{A}]$, $[\mathbf{C}]$ e $[\mathbf{D}]$, são oriundas dos termos transiente, advectivo e difusivo da equação de energia, respectivamente. O vetor não linear $\mathbf{N}(\mathbf{u})$ provém do termo advectivo da equação de movimento. As demais matrizes são devidas aos termos estabilizadores $\tau_{\mathbf{v}}$, τ_ϕ e δ.

Generalizando, para problemas mistos, o algoritmo proposto em (Hughes e Tezduyar, 1983) e introduzindo os parâmetros n_{max} (número máximo de passos de tempo), i_{max} (número máximo de correções) e ω (parâmetro de seleção do método predetor empregado), podemos escrever o seguinte algoritmo preditor/multicorretor trapezoidal generalizado para o sistema (36):

Algoritmo 1.

1. *inicialize* $\mathbf{u}_0^0, \mathbf{p}_0^0, \mathbf{a}_0^0$ e $\boldsymbol{\theta}_0^0$.

2. *faça* $n := 0$ e $i := 0$.

3. *fase preditora:*

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{n+1}^{(i)} := \mathbf{u}_n^{(i)} + \Delta t(1-\omega)\mathbf{a}_n^{(i)} \\ \mathbf{a}_{n+1}^{(i)} := \mathbf{0} \\ \mathbf{p}_{n+1}^{(i)} := \mathbf{p}_n^{(i)} \\ \boldsymbol{\theta}_{n+1}^{(i)} := \boldsymbol{\theta}_n^{(i)} \end{cases} \tag{37}$$

4. *forme e fatorize as matrizes incrementais* $[\mathbf{M}^*], [\mathbf{N}^*], [\mathbf{G}^*], [\mathbf{G}^{*T}], [\mathbf{G}^{\mathbf{v}}_\tau], [\mathbf{A}^*]e[\mathbf{C}^*]$ *definidas por:*

$$
\begin{aligned}
[\mathbf{M}^*] &:= [\mathbf{M}] + [\mathbf{M}^{\mathbf{v}}_\tau] + \omega\Delta t[\mathbf{N}^*] \\
[\mathbf{N}^*] &:= [\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1})] + [\frac{\partial \mathbf{N}^{\mathbf{v}}_\tau}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1})] + [\mathbf{K}] \\
&\quad + [\mathbf{K}^{\mathbf{v}}_\tau] + [\mathbf{K}^{\mathbf{v}}_\delta] \\
[\mathbf{G}^*] &:= [\mathbf{G}] + [\mathbf{G}^{\mathbf{v}}_\tau] \\
[\mathbf{G}^{*T}] &:= [\mathbf{M}^q_\tau] + \omega\Delta t([\mathbf{G}^T] \\
&\quad + [\frac{\partial \mathbf{N}^q_\tau}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1})] + [\mathbf{K}^q_\tau]) \\
[\mathbf{A}^*] &:= [\mathbf{A}] + [\mathbf{A}^\phi_\tau] \\
[\mathbf{C}^*] &:= [\mathbf{C}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1})] + [\mathbf{C}^\phi_\tau(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1})] + [\mathbf{D}] + [\mathbf{D}^\phi_\tau]
\end{aligned}
\tag{38}
$$

5. *forme os vetores residuais*

$$
\begin{cases}
\mathbf{R}^{(i)}_{n+1} := \mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{F}_{\tau\, n+1} - \big([\mathbf{M} + \mathbf{M}^{\mathbf{v}}_\tau]\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} \\
\qquad +\mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1}) + \mathbf{N}^{\mathbf{v}}_\tau(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1}) \\
\qquad +[\mathbf{K} + \mathbf{K}^{\mathbf{v}}_\tau + \mathbf{K}^{\mathbf{v}}_\delta]\mathbf{u}^{(i)}_{n+1} \\
+ \qquad [\mathbf{G} + \mathbf{G}^{\mathbf{v}}_\tau]\mathbf{p}^{(i)}_{n+1}\big) \\
\mathbf{S}^{(i)}_{n+1} := \mathbf{E}_{\tau\, n+1} - \big([\mathbf{M}^q_\tau]\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} + \mathbf{N}^q_\tau(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1}) \\
\qquad +[\mathbf{G}^T + \mathbf{K}^q_\tau]\mathbf{u}^{(i)}_{n+1} + [\mathbf{G}^q_\tau]\mathbf{p}^{(i)}_{n+1}\big) \\
\mathbf{T}^{(i)}_{n+1} := \mathbf{Q}_{n+1} + \mathbf{Q}_{\tau\, n+1} - \big([\mathbf{A} + \mathbf{A}^\phi_\tau]\dot{\boldsymbol{\theta}}^{(i)}_{n+1} \\
\qquad +[\mathbf{C}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1}) + \mathbf{C}(\mathbf{u}^{(i)}_{n+1}) \\
\qquad +\mathbf{D} + \mathbf{D}^\phi_\tau]\boldsymbol{\theta}^{(i)}_{n+1}\big)
\end{cases}
\tag{39}
$$

6. *resolva o sistema incremental*

$$
\begin{cases}
[\mathbf{M}^*]\Delta\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} + [\mathbf{G}^*]\Delta\mathbf{p}^{(i)}_{n+1} = \mathbf{R}^{(i)}_{n+1} \\
[\mathbf{G}^{*T}]\Delta\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} + [\mathbf{G}^q_\tau]\Delta\mathbf{p}^{(i)}_{n+1} = \mathbf{S}^{(i)}_{n+1} \\
[\mathbf{A}^*]\Delta\dot{\boldsymbol{\theta}}^{(i)}_{n+1} + [\mathbf{C}^*]\Delta\boldsymbol{\theta}^{(i)}_{n+1} = \mathbf{T}^{(i)}_{n+1}
\end{cases}
\tag{40}
$$

7. *fase corretiva:*

$$
\begin{cases}
\mathbf{u}^{(i+1)}_{n+1} := \mathbf{u}^{(i)}_{n+1} + \omega\Delta t\Delta\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} \\
\mathbf{a}^{(i+1)}_{n+1} := \mathbf{a}^{(i)}_{n+1} + \Delta\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} \\
\mathbf{p}^{(i+1)}_{n+1} := \mathbf{p}^{(i)}_{n+1} + \Delta\mathbf{p}^{(i)}_{n+1} \\
\boldsymbol{\theta}^{(i+1)}_{n+1} := \boldsymbol{\theta}^{(i)}_{n+1} + \Delta\boldsymbol{\theta}^{(i)}_{n+1}
\end{cases}
\tag{41}
$$

8. *se* $i < i_{max}$, *então* $i := i + 1$ *e retorne ao passo 4; caso contrário,* $i := 0$ *e*

$$
\begin{cases}
\mathbf{u}^{(i)}_{n+1} := \mathbf{u}^{(i_{max})}_{n+1} \\
\mathbf{a}^{(i)}_{n+1} := \mathbf{a}^{(i_{max})}_{n+1} \\
\mathbf{p}^{(i)}_{n+1} := \mathbf{p}^{(i_{max})}_{n+1} \\
\boldsymbol{\theta}^{(i)}_{n+1} := \boldsymbol{\theta}^{(i_{max})}_{n+1}
\end{cases}
\tag{42}
$$

9. *se* $n < n_{max}$, *então* $n := n + 1$ *e retorne ao passo 3; caso contrário, termine.*

Comentários. (1) Através do parâmetro ω, podemos selecionar a estratégia de predição do algoritmo 1: *Euler progressivo* ($\omega = 0$), *Crank-Nicolson* ($\omega = 1/2$) e *Euler regressivo* ($\omega = 1$).

(2) A algoritmo 1 lineariza o vetor $\mathbf{N}(\mathbf{u})$ da eq.(36), a cada passo corretivo i, através de sua expansão em série de Taylor,

$$\mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i+1)}) \cong \mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i)}) + \partial\mathbf{N}(\mathbf{u}^{(i)}/\partial\mathbf{u}$$

RESULTADOS NUMÉRICOS

O Problema da Cavidade. Considere o escoamento não-isotérmico numa cavidade biunitária com uma das paredes móveis. As condições de contorno são velocidade e temperatura unitárias prescritas no topo da cavidade e aderência do fluido e temperatura nula nas demais paredes. O domínio do problema foi discretizado uniformemente por 8x8 elementos de igual-ordem da família de *Serendipity* Q2S.

Os campos de velocidade, pressão e temperatura definidos pelo sistema (19) foram aproximados de maneira estável pela formulação estabilizada de elementos finitos, eqs.(25)-(27), para regimes de escoamentos advectivos-dominados; na Figura 1, são apresentados os resultados do campo de velocidade para Re = 400 e Pe = 10^6. O número de nós é praticamente o mesmo usado por Tezduyar et al. (Teazduyar et al., 1990) para uma combinação igual-ordem de elementos Q1 lagrangeanos, havendo uma boa concordância entre as duas simulações numéricas.

Gostaríamos, por fim, de frisar que as simulações computacionais foram realizadas com elementos de igual-ordem e altos números de Reynolds e Péclet, situações nas quais o método de Galerkin é potencialmente instável.

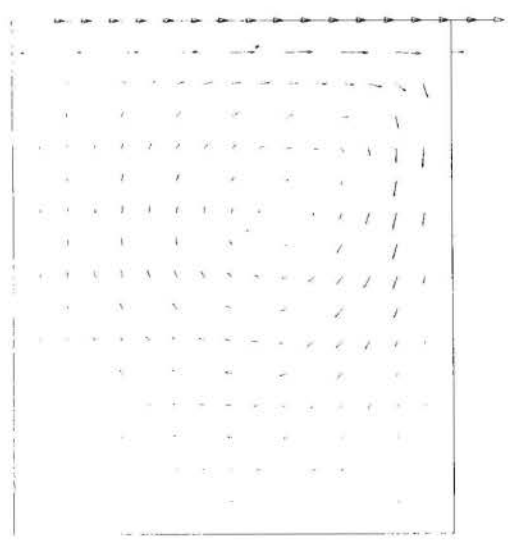


Figura 1 - O problema da cavidade (Re = 400,Pe = 10^6).

COMENTÁRIOS FINAIS

Após a apresentação da Cinemática e Dinâmica dos Fluidos, este trabalho introduziu um método estabilizado de elementos finitos para transferência de calor por convecção nos escoamentos incompressíveis transientes de Navier-Stokes. O método proposto não necessita satisfazer à condição de *Babuška-Brezzi*, permitindo, assim, a utilização de elementos finitos de igual-ordem. Graças ao desenho de seus parâmetros de estabilidade $\tau_{\mathbf{v}}$, τ_{ϕ} e δ e de um robusto algoritmo preditor/multi-corretor, o método é capaz de aproximar acuradamente situações fortemente advectivas. Os testes numéricos realizados utilizaram interpolações de *Serendipity* de igual-ordem e altos números de Reynolds e Peclét, criando, assim, situações para as quais sabemos *a priori* ser o método de Galerkin instável.

Perspectivas futuras. Da maneira como foi definido pelas eqs.(37-42), o algoritmo (1) não apenas integra problemas de convecção *forçada* como também de convecção *mista* de calor, já que monta e soluciona simultâneamente o sistema semi-discreto definido pelas eqs.(36). Bastaria, de modo a também considerar o fenômeno de convecção natural, adotarmos a *hipótese de Boussinesq* (Landau e Lifchitz, 1971), substituindo o termo de pressão ∇p da eq.(19) por um termo de empuxo função da temperatura θ, acoplando assim o sistema de equações resultante.

Agradecimentos. Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Mecânica Teórica e Aplicada (LMTA) da Universidade Federal Fluminenese e apoiado pelo CNPq. Proc. 520408/94-2. Durante sua realização, seu autor foi parcialmente financiado pelo CNPq Proc. 350747/93-8.

REFERÊNCIAS.

Brooks, A.N. e Hughes, T.J.R., 1980, "Streamline upwind/Petrov-Galerkin methods for advection dominated flows", *Third International Conference on Finite Element Methods in Fluid Flows*, Banff, Canada.

Ciarlet, P.G., 1978, "The finite element method for elliptic problems", North-Holland, Amsterdam.

Franca, L., e Frey, S., 1992, "Stabilized Finite Element Methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 99, pp.209-233.

Franca, L., Frey, S., e Hughes, T.J.R., 1992, "Stabilized Finite Element Methods: I. Application to the advective-diffusive model", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 95, pp.253-276.

Gurtin, M.E., 1981, "An introduction to continuum mechanics", Academic Press, New York.

Hughes, T.J.R., e Franca, L., 1987, "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VII. The Stokes problem with various well-posed boundary conditions", *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 65, pp.85-96.

Hughes, T.J.R., e Tezduyar, T.E., 1983, "Finite element methods for first-order hyperbolic systems with particular emphasis on the compressible Euler equations", *Preprint CLaSSIC*-**83-04**, Projeto CLaSSIC, NASA, USA.

Johnson, C., 1987, "Numerical solution of partial differential equations by the finite element method", Cambridge University Press, Cambridge.

Kays, W.M., e Crawford, M.E., 1980, "Convective heat and mass transfer", McGraw-Hill, New York.

Landau, L., e Lifchitz, E., 1971, "Mécanique des fluides", Ed. Mir, Moscou.

Sampaio, P.A.B., 1991, "A Petrov-Galerkin formulation for the incompressible Navier-Stokes equations using equal-order interpolation for velocity and pressure", *Int. Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 31, pp.1135-1149.

Tezduyar, T.E., Shih, R., Mittal, S. e Ray, S.E., 1990, "Incompressible flow using stabilized bilinear and linear equal-order-interpolation velocity-pressure elements", *Preprint UMSI* **90/165**, University of Minnesota/Supercomputer Institute, Minneapolis.

Truesdell, C. e Toupin, R.A., 1960, "The classical field theory", Handbuch der Physik III/1, Springer-Verlag, Berlin.

Van Wylen, G.J., e Sonntag, R.E., 1978, "Fundamentals of classical thermodynamics", John Wiley, New York.

ABSTRACT

In this article we have introduced a stabilized finite element method for heat convection in incompressible Navier-Stokes flows. This method was constructed in order to inherit the good stability features of the stabiized methods already introduced for the Stokes model; that is to say, there is no need of satisfy the Babuška-Brezzi condition and it is projected to remain stable even in very high advective flows. The method treats the non-linearity of the model as well its evolutive characteristic via a predictor/multi-corrector algorithm based upon the generalized trapezoidal family of predictor methods.

ON THE ACCURACY OF FINITE ELEMENT SOLUTIONS OF THERMAL PROBLEMS

Adriana S. Franca
Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Minas Gerais
30160-030 - Belo Horizonte - MG - BRASIL

Kamyar Haghighi
Dep. of Agricultural and Biological Eng.
Purdue University
West Lafayette, IN 47907-1146 USA

SUMMARY

This study presents the development of an error estimation procedure and adaptive refinement technique for general heat transfer problems. The proposed methodology is generic and is easily applied to steady-state, transient, linear and nonlinear problems involving heat transfer by conduction and convection. Unlike other procedures available in the literature, the error estimation procedure presented here accounts for the coupling effect of the dependent variables (velocity, temperature) on the discretization error and, consequently, on the adaptive meshes. The performance of the method was evaluated in an application to a microwave driven convection problem.

INTRODUCTION

The finite element method is one of the most commonly applied numerical methods for solution of boundary value problems. This technique has been the subject of a significant amount of study over the last decades. Numerous and significant advances on the theoretical basis and algorithmic tools of the finite element method have been introduced over the past years. However, the application of this method for a particular problem is still mostly based on intuition and knowledge that was gained from solving similar problems.

The use of either a refined discretization mesh or higher order interpolation functions improves the accuracy of the finite element solution of a given problem. However, in both cases there is a drastic increase in computational requirements. Thus, selective refinement over the critical areas of the domain would be more efficient. This selective refinement can be accomplished by using an adaptive procedure. The basic principle of an adaptive procedure is that, on the basis of error analysis, a finite element solution can indicate which regions of the calculation domain need refinement. This information is then used to modify the mesh in order to obtain the desired level of accuracy using the lowest possible number of degrees of freedom (Zienkiewicz and Taylor, 1989).

There is an extensive amount of work on the application of adaptive techniques to elasticity and fluid dynamics problems (Zienkiewicz and Zhu, 1987; Wu et al., 1990; Lewis et al., 1991; Oden et al., 1993). Other application areas include air flow inside grain dryers (Franca and Haghighi, 1995) and simultaneous heat and mass transfer (Oliveira and Haghighi, 1995). The application of adaptive techniques to heat transfer problems is quite recent. Both diffusive- (Huang and Lewis, 1989; Probert et al., 1989; Chang, 1993; Franca and Haghighi, 1994) and convective-type problems (Wang and Carey, 1990; Pelletier and Ilinca, 1993) have been analyzed.

The study by Pelletier and Hétu (1992) presented an adaptive methodology for solution of incompressible flow problems including heat transfer and non-Newtonian effects. The presented error estimator did not take into account the effect of temperature. In the methodology proposed by Pelletier and Ilinca (1993), a combined norm was defined as a sum of the square of the individual norms of velocity, pressure and temperature.

The objective of this study was to present the development of the formulation of an adaptive finite element methodology for heat transfer problems. The refinement procedure is based on an error estimator that takes into account the combined effects of temperature and velocity gradients on the discretization error and, consequently, on the adaptive meshes.

THEORETICAL ANALYSIS

This section presents the governing equations, error analysis and adaptive strategy for general heat transfer problems.

Heat transfer equation. The convective transport of thermal energy can be described in general form by the following set of equations:

$$c_i\left(\frac{\partial \phi_i}{\partial t}\right) + u_j\left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x_j}\right) = \frac{\partial J_{ij}}{\partial x_j} + B_i + S_i \qquad (1)$$

where

$$\phi^T = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & u_3 & T \end{bmatrix} \qquad (2)$$

$$c^T = \rho\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & c_p \end{bmatrix} \qquad (3)$$

$$B^T = \rho\left(1-\beta\left(T-T_0\right)\right)\begin{bmatrix} g_x & g_y & g_z & 0 \end{bmatrix} \qquad (4)$$

$$S^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & q''' \end{bmatrix} \qquad (5)$$

$$J_{ij} = \begin{cases} \tau_{ij} & i = 1,3 \\ q_j & i = 4 \end{cases} \qquad (7)$$

$$q_j = k\frac{\partial T}{\partial x_j} \qquad (8)$$

with the constitutive equation:

$$\tau_{ij} = -P\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \qquad (9)$$

where u_i represents the velocity components, T is the temperature, ρ is the density, c_p is the heat capacity, τ_{ij} represents the stress tensor, β is the thermal expansion

coefficient, g is the gravity acceleration, μ is the viscosity, P is the pressure, q''' is a volumetric heat source, and q is the heat flux. This study assumes Newtonian behavior, incompressible fluids and laminar flows. For flows involving buoyancy forces, the Boussinesq approximation is applied. Viscous dissipation is neglected. Appropriate initial and boundary conditions (Dirichlet, Neumann) complete the statement of the problem.

Error analysis. A local error measure (e) can be defined as the difference between the vector containing the exact values of the dependent variables (ϕ) and the vector containing the finite element solution ($\bar{\phi}$)

$$e = \phi_i - \bar{\phi}_i \tag{10}$$

The previous error measure is based on pointwise differences between the approximate and exact values of the dependent variables and can vary from point to point inside the discretization domain. This pointwise error definition is usually not convenient and sometimes misleading. For instance, in heat transfer problems the development of gradient singularities is common. In such cases the error can be locally infinite, but the overall solution may be acceptable. For this reason, several global error norms have been used. One of the most common of these norm is the error energy norm (Zienkiewicz and Zhu, 1987). This norm can be written in general form as

$$\|e\|^2 = \int_\Omega e^T L e \, d\Omega \tag{11}$$

where L is the linear operator applied to the dependent variable, e is a pointwise error measure, and Ω is the computational domain. Application of the error definition (Eq. 10) and the linear operator of the governing equation ($L = \partial J_{ij} / \partial x_j$) to the definition of energy norm (Eq. 11) leads to the following error estimator:

$$\|e\|^2 = \int_\Omega \frac{\partial(\phi_i - \bar{\phi}_i)}{\partial x_j}\left(J_{ij} - \bar{J}_{ij}\right) d\Omega \tag{12}$$

Similarly, the energy norm of the dependent variables can be defined:

$$\|\phi\|^2 = \int_\Omega \phi_i L \phi_i \, d\Omega = \int_\Omega \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} J_{ij} \, d\Omega \tag{13}$$

Thus, the error can be represented in terms of a relative quantity

$$\eta = \frac{\|e\|}{\|\phi\|} \tag{14}$$

The evaluation of the norms defined previously requires knowledge of the exact values of velocity and temperature gradients, which are not known. Therefore, an effective approximation to these exact values must be found. The averaging procedure proposed by Franca and Haghighi (1996) was used in this study. The implementation of the adaptive refinement procedure is described in detail by Oliveira et al. (1995).

IMPLEMENTATION

The set of governing differential equations was solved by a penalty finite element model , using the finite element code FIDAP (1993). The error estimation is performed by a separate subroutine that reads the analysis results from a FIDAP file, evaluates the error and designs the new mesh. The code is fully automatic and the user is only required to build the initial coarse mesh. The mesh generator developed by Kwok et al. (1995) was used to create the meshes.

Example 1 - Validation. The problem under consideration is that of a two-dimensional steady flow of a Boussinesq fluid. The geometry and boundary conditions of the flow region are displayed in Figure 1.

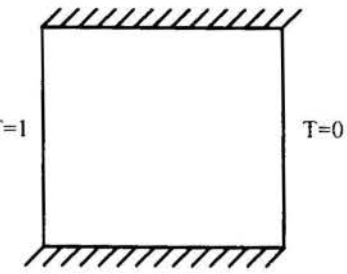


Figure 1 - Schematic diagram of example 1

All simulations were performed for normalized conditions. Raleigh (Ra) and Prandtl (Pr) values were Ra = 1×10^3, 1×10^4, 1×10^5, 1×10^6, and Pr = 0.71. The target relative errors were η=0.05 for Ra = 1×10^3, 1×10^4 and η=0.10 for Ra = 1×10^5, 1×10^6 . The initial and adaptive meshes for Ra = 1×10^6 are displayed in Figure 2. The resulting plots of velocity vectors and temperature isolines are displayed in Figure 3. The regions where higher velocity and temperature gradients were concentrated correspond to the regions where the refinements were concentrated.

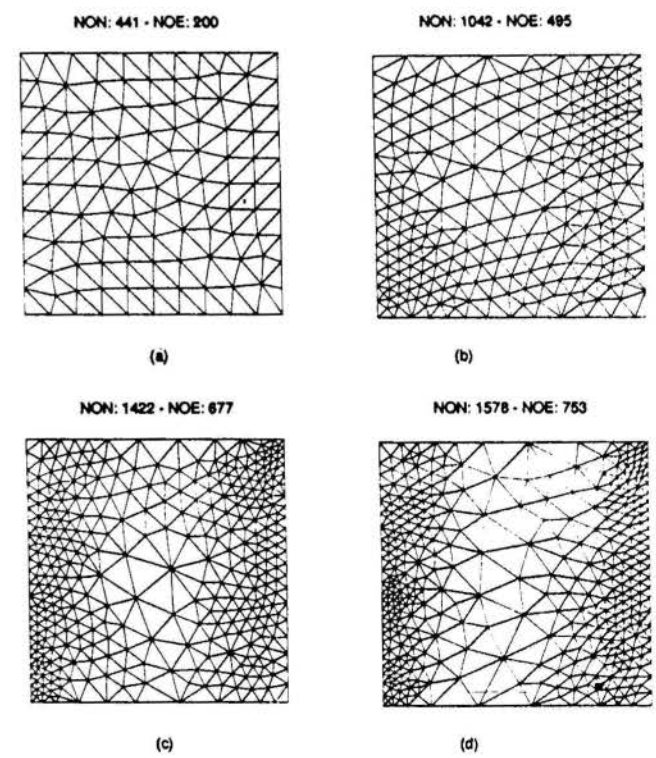


Figure 2 - (a) Initial, (b) first, (c) second and (d) third adaptive meshes for Ra = 1×10^6 ((a) η = 0.2734; (b) η = 0.1520; (c) η = 0.1129; (d) η = 0.0647)

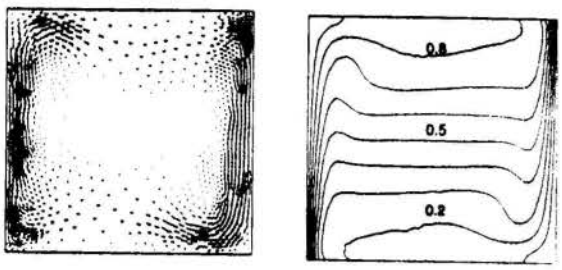


Figure 3 - Velocity vectors and temperature isolines for $Ra = 1\times10^6$ ($v_{max} = 0.271$)

A comparison between the results from this study and the benchmark results from DeVahl Davis (1983) is presented in Table 1. Nu_o corresponds to the average value of Nusselt number at the left wall, and Nu_{max} and Nu_{min} are the respective maximum and minimum values of Nusselt at the left wall. Figure 4 displays the convergence rate plots for adaptive and uniform refinements. A comparison between the slopes for adaptive and uniform meshes shows that the use of adaptive techniques resulted in more accurate results and much faster convergence rates. Also, the convergence rate was always constant for uniform refinements, independent of Ra values. A comparison of CPU times for adaptive and uniform refinements is displayed in Figure 5. CPU requirements were always higher for uniform refinements in comparison with the adaptive methodology. These results demonstrate that the use of adaptive techniques leads to improvements in solution accuracy and to a more efficient methodology.

Table 1. Comparison between simulation and benchmark results.

	Nu_o		Nu_{max}		Nu_{min}	
	(1)	(2)	(1)	(2)	(1)	(2)
1×10^3	1.116	1.117	1.502	1.505	0.694	0.692
1×10^4	2.249	2.238	3.504	3.528	0.583	0.586
1×10^5	4.516	4.509	7.586	7.717	0.810	0.729
1×10^6	8.907	8.817	17.40	17.93	0.930	0.989

(1) This study
(2) DeVahl Davis (1983)

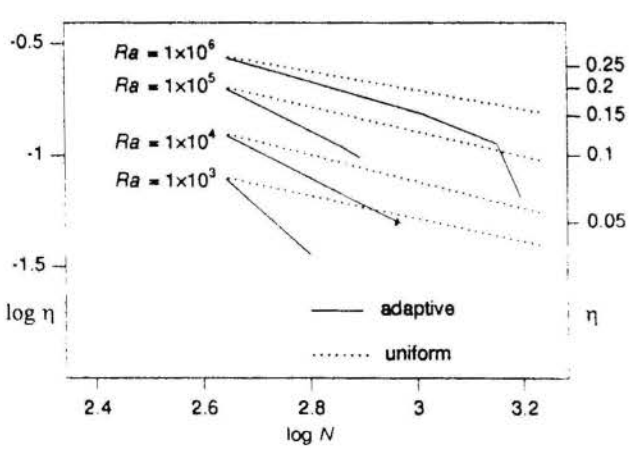


Figure 4 - Convergence rates for adaptive and uniform refinements.

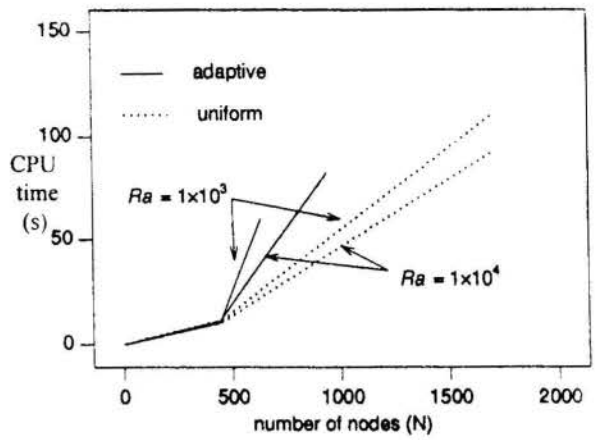


Figure 5 - CPU times for adaptive and uniform refinements.

Microwave driven convection. The temperature distribution in a substance subjected to microwave radiation is governed by the interaction and absorption of radiation by the medium and the transport processes due to the dissipation of electrical energy into heat. In the case of liquid products, microwave heating can be modeled by solving the Navier-Stokes and energy equations. The heat generated by microwaves is taken into account through the heat source term in the energy equation. According to Datta et al. (1992) the heat generated by microwaves at a given radial location in a cylindrical container can be approximated by

$$q''' = Q_o e^{-(R-r)/\delta} \tag{15}$$

where R is the container radius, Q_o is the heat generation rate at the body surface and δ is the penetration depth. Assuming that the container is microwave transparent and using water as a model fluid, the temperature dependence of dielectric properties can be considered by varying the penetration depth with temperature (Datta et al., 1992)

$$\delta = 0.004408 + 0.0005752 \times T \qquad (20^oC < T < 55^oC) \tag{16}$$

An average value of $Q_o = 1125$ W/cc was used, so that the results from this study could be compared to the experimental data by Datta et al. (1992).

This problem consists of simulation of microwave heating of water in a cylindrical container having 17 cm of diameter and 10.5 cm of height. Since the container, the the heat generation rate and the penetration rate are axisymmetric, the problem can be considered axisymmetric. It was also assumed that the container was completely filled with water and covered with aluminum foil. Boundary conditions were no slip at the container walls and top portion, zero heat flux at all boundaries, and zero velocity gradients at the left boundary (symmetry). The initial water temperature was 25°C. Average constant values of material properties were used (Datta et al., 1992).

The discretization meshes are displayed in Figure 6. NOE and NON correspond to number of elements and number of nodes, respectively. Four refinements were necessary in order to attain the desired accuracy level (10% maximum relative error). The adaptive meshes are more refined near the container

right wall. This behavior was expected because more intensive microwave heating occurred near the wall. As heating progressed, the fluid near the wall became lighter., moving upwards. The heavier and colder fluid near the symmetry axis moved downwards, creating a recirculation pattern.

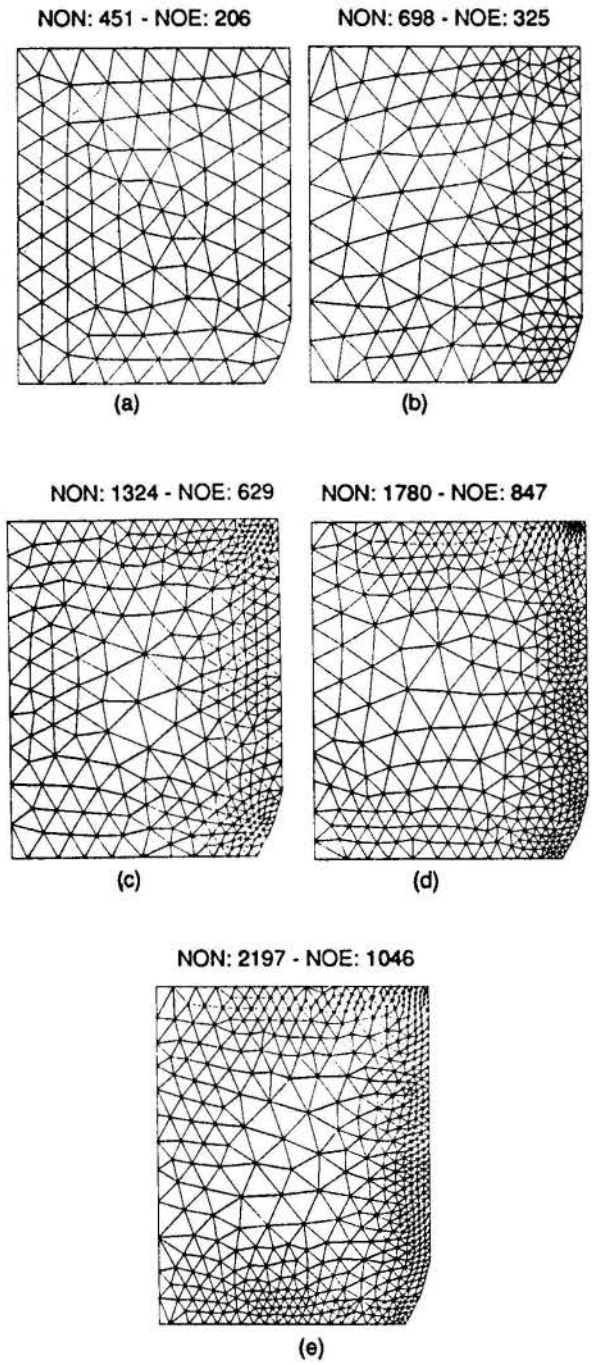


Figure 6 - Initial and adaptive meshes.

Figure 7 displays the velocity vectors, streamlines and temperature isolines after 3 min. Higher temperature values were always concentrated near the right top portion of the container and lower temperature values were always at the bottom of the containers. A comparison between Figure 7 and the adaptive meshes (Figure 6) shows that the physical behavior of the system is reflected in the refinements.

The radial temperature distribution at a height of 6.4cm is displayed in Figure 8, and the axial temperature distribution at a radius value of 5.1 cm is displayed in Figure 9. The bullets correspond to experimental data, and the dotted lines correspond to the results obtained by Datta et al. (1992) using finite differences. The solid lines correspond to the results from the adaptive analysis. There is good agreement between simulation and experimental results. The radial heating was very uniform, due to the convective flow. The axial temperature distribution shows stratification, leading to higher temperatures with height. It is interesting to notice that both the experimental and finite differences results do not reflect the fluid movement, since temperature variations are practically linear. The fluid movement is well captured by the adaptive procedure and it is reflected by the higher temperature variations near the domain boundaries.

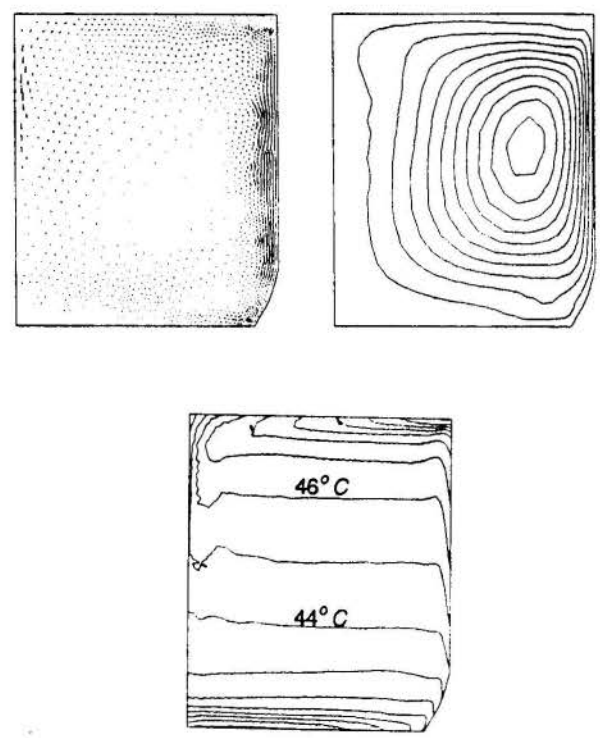


Figure 7 - Velocity vectores, streamlines and temperature isolines after 3 min. (v_{max} = 0.0103 m/s)

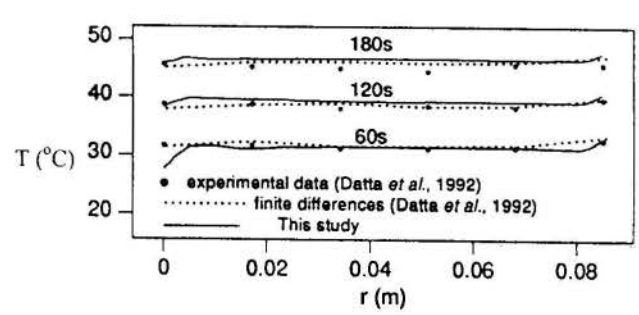


Figure 8 - Radial temperature distribution at H=6.4 cm.

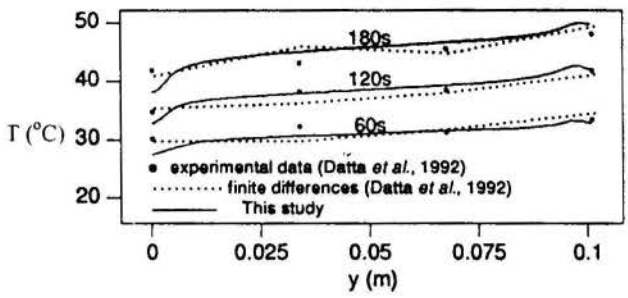


Figure 9 - Axial temperature distribution at R = 5.1 cm.

CONCLUSIONS

A methodology for adaptive finite element analysis of heat transfer problems was presented. Two example problems were used to evaluate the performance of the technique. Comparisons between results from the adaptive approach and results from a conventional finite element approach (uniform meshes) illustrated the efficiency of the proposed methodology. Also, comparisons between the results from the adaptive analysis and experimental data demonstrated the reliability of the technique.

ACKNOWLEDGEMENT

Adriana S. Franca wishes to acknowledge that this paper was written under the support of the Brazilian Government Agency CNPq, at the Mechanical Engineering Department, Universidade Federal de Minas Gerais.

REFERENCES

Chang, I.S., 1993, "Adaptive, unstructured, finite element, multimaterial thermal analysis", *Journal of Spacecraft and Rockets*, Vol. 30, pp. 43-50.

Datta, A., Prosetya, H. and Hu, W., 1992, "Mathematical modeling of batch heating of liquids in a microwave cavity", *Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy*, Vol. 27, pp. 38-47.

DeVahl Davis, G., 1983, "Natural convection of air in a square cavity: a benchmark numerical solution", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 3, pp. 249-264.

Franca, A.S. and Haghighi, K., 1996, " Error estimation and finite element analysis of convective heat transfer problems - part I: theoretical considerations", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 29, pp.479-490.

Franca, A.S. and Haghighi, K., 1995, "Adaptive finite element analysis of air flow inside grain dryers", *Drying Technology*, Vol. 13, pp. 125-146.

Franca, A.S. and Haghighi, K., 1994, "Adaptive finite element analysis of transient thermal problems", *Numerical Heat Transfer, Part B*, Vol. 26, pp. 274-294.

FIDAP, 1993, User's manual, Revision 7.0, Fluid Dynamics International Inc.

Huang, H.C. and Lewis, R.W., 1989, "Adaptive analysis for heat flow problems using error estimation techniques", *Proc. Sixth Int. Conf. Num. Meth. Thermal Problems*, Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol. 6, pp. 1029-1044.

Kwok, W., Haghighi, K. and Kang, E., 1995, "An efficient data structure for advancing front triangular mesh generation technique", *Com. Num. Meth. Eng.*, Vol. 11, pp. 465-473.

Lewis R.W., Usmani, A.S. and Cross, J.T. , 1991, "Finite element analysis of heat transfer and flow problems using adaptive remeshing including application to solidification problems", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 32, pp. 767-781.

Oden J.T., Wu, W. and Ainsworth, M., 1993, "An a-posteriori error estimate for FE approximations of the Navier-Stokes equations", *TICOM Report TR93-05*, Austin, TX.

Oliveira, L.S., Franca, A.S. and Haghighi, K., 1995, "An adaptive approach to finite element modeling of drying problems", *Drying Technology*, Vol 13, pp. 1167-1185.

Oliveira, L.S. and Haghighi, K., 1995, "A new unified a posteriori error estimator for adaptive finite element analysis of coupled transport problems", *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 38, pp. 2809-2819.

Pelletier, D.H. and Ilinca, F., 1993, "Adaptive finite element solution of complex viscous flow", *Advances in FEA in Fluid Dynamics*, ASME, FED Vol. 138, pp. 11-20.

Pelletier, D.H. and Hétu , J., 1992, "An adaptive finite element methodology for incompressible viscous flow", ASME, FED Vol. 137, pp. 1-11.

Probert, E.J., Hassan, O., Morgan, K. and Peraire, J., 1991, "Adaptive remeshing applied to the thermal analysis of a convectively cooled cylindrical leading edge", *Proc. Seventh Int. Conf. Num. Meth. Thermal Problems*, Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol. 7, pp. 811-823.

Wang , K.C. and Carey, G.F., 1990, "Adaptive grids for coupled-viscous flow and transport", *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 82, pp. 365-383.

Wu J., Zhu, J.Z., Szmelter, J. and Zienkiewicz, O.C. , 1990, "Error estimation and adaptivity in Navier-Stokes incompressible flows", *Comp. Mech.*, Vol. 6, pp. 259-270.

Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L., 1989, "The finite element method", McGrall-Hill, Vol. 1, 4th ed.., New York.

Zienkiewicz, O.C. and Zhu, J.Z., 1987, "A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 24, pp. 337-357.

NOVAS FORMULAÇÕES PETROV-GALERKIN PARA ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS. PARTE I: ANÁLISE NUMÉRICA DO PROBLEMA MODIFICADO DE STOKES.

Do Carmo, E. G. D.
Programa de Engenharia Nuclear - COPPE/UFRJ
Traiano, F. M. L. e Dos Santos, L. C. C.
Programa de Engenharia Mecânica - COPPE/UFRJ
CP. 68.503, Rio de Janeiro - RJ, 21.945-970, Brasil

RESUMO

É apresentada uma formulação Petrov-Galerkin em variáveis primitivas para escoamentos incompressíveis, baseada em Karam (1989), permitindo espaços de interpolação de mesma ordem para pressão e para velocidade, com pressão descontínua e velocidade contínua. É acrescida a formulação de Karam (1989) a possibilidade de eliminação total da pressão a nível de elemento utilizando uma penalização diferenciada por elemento da média do divergente do campo de velocidade a nível de elemento. São apresentados resultados de existência e unicidade para formulação discreta do problema modificado de Stokes, bem como estimativas de taxas de convergência confirmando que quando o máximo parâmetro de penalização tende a zero a formulação apresentada tende para a de Karam (1989).

INTRODUÇÃO

O método dos elementos finitos é um método numérico para a solução de sistemas de equações diferenciais parciais que ocorrem na ciência e na engenharia. Em mecânica dos fluidos, as patologias numéricas advindas de problemas com convecção dominante (Cerqueira de Almeida (1993)) e restrição de incompressibilidade (Karam (1989)), são consideradas resolvidas deste o final dos anos oitenta. Desta forma, o método dos elementos finitos é considerado pelo menos tão preciso na solução de modelos matemáticos em mecânica dos fluidos quanto os métodos mais tradicionais utilizados como o método das diferenças finitas (Anderson (1984)) e o método dos volumes finitos (Patankar (1980)). Hoje o método dos elementos finitos passa por uma fase de consolidação e de otimização em sistemas computacionais em mecânica dos fluidos. De fato, redução de tempo de processamento e redução de requisitos de memória são as palavras de ordem.

Em Karam (1989) é apresentada uma formulação de Petrov-Galerkin que permite interpolações de igual ordem para os campos de pressão e velocidade, descontinua para a pressão e continua para a velocidade. A componente da pressão com média nula é eliminada a nível de elemento, porém a componente constante por partes da pressão não. Desta forma é necessário resolver um sistema acoplado entre as componentes do campo de velocidade e as componentes médias a nível de elemento do campo de pressão, o que retira um pouco do atrativo desta formulação quando comparada a mesma formulação utilizando a pressão total continua, como em Franca (1992). Neste trabalho tal deficiência é eliminada com a utilização da "penalização", diferenciada por elemento, da média do divergente do campo de velocidade a nível de elemento o que permite a eliminação completa da pressão a nível do elemento, resultando num sistema de equações exclusivamente para o campo de velocidades. O que além de reduzir o número de graus de liberdade por ponto da malha também reduz a largura de banda do sistema a ser resolvido, o que resulta em grande ganho computacional, em termos de espaço e tempo de execução, bem como uma maior simplicidade de implementação.

Neste trabalho são apenas apresentados os resultados da análise numérica da formulação proposta. As provas dos resultados podem ser encontradas em Dos Santos,L.C.C. (1996) ou em Traiano, F.M.L. (1996).

HISTÓRICO

Para problemas com restrição interna de incompresibilidade, como o problema de escoamento lento, o problema de Stokes, a primeira dificuldade é a satisfação à priori da restrição quando o problema é formulado em variáveis primitivas, ou seja, em função da pressão e da velocidade.

A utilização de função de corrente de forma a satisfazer a restrição de incompressibilidade de forma exata possui alguns inconvenientes como ser restrita apenas ao espaço de duas dimensões e de obter as variáveis de interesse, a pressão e a velocidade, a partir de derivadas (com consequente perda de precisão).

Uma primeira tentativa de evitar a satisfação à priori da restrição de incompressibilidade foi obtida através do método de penalização de Zienkiewicz(1974) que introduz uma pequena "compressibilidade" no problema e procura a solução quando esta "compressibilidade" tende a zero. Desta forma, consegue-se satisfazer aproximadamente a restrição de incompressibilidade, mas não consegue-se convergir na forma discreta, exigindo-se a formulação uma forma discreta diferente da contínua com a utilização de técnicas de integração reduzida ou integração seletiva do termo penalizado.

Uma alternativa natural de satisfazer a restrição de incompressibilidade de forma aproximada, a princípio, é a técnica dos multiplicadores de Lagrange, a qual introduz a restrição de incompressibilidade na forma variacional do problema, gerando assim um modelo que quando aproximado (restrito a espaços de dimensão finita) é o clássico método

misto de Galerkin. A partir daí, surge uma nova complicação pois sabe-se que muitos elementos (como os altamente atrativos do ponto de vista computacional que possuem a mesma ordem de interpolação para os campos de pressão e velocidade.) dão origem a fenômenos indesejáveis como o trancamento do campo de velocidade (o campo de velocidade pode se anular em todo domínio) e a oscilações espúrias do campo de pressão. Assim, a construção de aproximações de elementos finitos mistos está relacionada com o problema da escolha de combinações entre as interpolações de pressão e de velocidade. A compatibilidade entre as aproximações para problemas elíticos lineares é ditada pelas versões discretas do lema de Babuska(1971), ou do teorema de Brezzi(1974), que forneçem condições de existência, unicidade e estabilidade para estes problemas. No caso de problemas com restrição interna, ao contrário daqueles que se ajustam aos modelos cinemáticos, as propriedades do problema contínuo não são automáticamente transferidas para o problema discreto. Consequentemente, as condições de compatibilidade devem ser verificadas para cada escolha particular dos espaços de aproximação. Quando posto a esta prova, o método misto de Galerkin fornece muito poucas combinações estáveis.

Em Malkus e Hughes(1978), demonstrou-se a equivalência entre os métodos de penalização com integração reduzida ou seletiva e os métodos mistos atráves da equivalência entre as matrizes de rigidez de ambos os métodos.

Karam (1989), propõe uma formulação mista de Petrov-Galerkin que permite interpolações de mesma ordem para a pressão e a velocidade com a pressão interpolada de forma descontínua e a velocidade de forma contínua. Com esta formulação, elimina-se a componente com média nula da pressão a nível do elemento. Entretanto, a componente constante por partes da pressão tem que ser determinada de forma acoplada com o campo de velocidade para cada elemento, o que reduz o apelo desta metodologia em relação a de pressão total contínua.

No presente trabalho apresentamos uma nova formulação de Petrov-Galerkin que acresce à metodologia de Karam (1989) a possibilidade de eliminação total da pressão a nível de elemento, o que efetivamente reduz um grau de liberdade das incógnitas do problema por ponto no sistema de equações a ser resolvido.

FORMULAÇÃO FORTE

Seja Ω uma região aberta limitada em R^n, n = 2,3, com contorno suave por partes Γ tal que $\overline{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ e com normal exterior a Γ $\underline{n}$. O problema modificado de Stokes em sua forma forte consiste em:

Dados $D_i(x)$, $N_i(x)$, $g(x)$ e $f_i(x)$ determinar $\{U,p\}$, tal que:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = g(x) \quad \text{em } \Omega \tag{1a}$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = f_i(x) \quad \text{em } \Omega \tag{1b}$$

com as seguintes condições de contorno

$$U_i(\mathbf{x}) = D_i(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Gamma_D \tag{1c}$$

$$\sigma_{ij} n_j(\mathbf{x}) = N_i(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Gamma_N \tag{1d}$$

$$\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \quad \text{e} \quad \Gamma_N \cap \Gamma_D = \varnothing$$

onde:

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \mu\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)$$

Obs.:

$$\text{Se } \Gamma_N = \varnothing \Rightarrow \int_\Gamma D_i n_i \, d\Gamma = \int_\Omega g(x) d\Omega \quad \text{e} \int_\Omega p \, d\Omega = 0$$

FORMA MISTA DE GALERKIN

Definindo:

1) Q e Q^v: espaços dos campos de pressão e das variações para a pressão respectivamente

$$Q = Q^v = \begin{cases} \{q \in L^2(\Omega);\ \Gamma_N \neq \varnothing\} \\ \{q \in L^2_\ell(\Omega) \text{ t.q. } (q,1) = 0;\ \Gamma_N = \varnothing\} \end{cases}$$

2) V e V^v: conjunto dos campos de velocidades admissíveis e espaço das variações admissíveis para a velocidade, respectivamente

$$V^v = \left\{\mathbf{v} \in \left(H^1\right)^3 | v_i(\mathbf{x}) = 0 \ \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D\right\}$$

$$V = \left\{\mathbf{U} \in \left(H^1\right)^3 | U_i(\mathbf{x}) = D_i \ \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D\right\}$$

O problema dado pelas equações (1a-d) é definido na forma variacional clássica por:

Determinar $\{U, p\} \in V \times Q$, tal que:

$$b(q, \mathbf{U}) = \ell_{div}(q) \qquad q \in Q^v$$

$$(\mathbf{U}, \mathbf{v}) + b(p, \mathbf{v}) = \ell(\mathbf{v}) \quad \mathbf{v} \in V^v$$

onde

$$a(\mathbf{U}, \mathbf{v}) = \mu \int_\Omega \frac{\partial U_i}{\partial x_j}\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega$$

$$b(q, \mathbf{v}) = -\int_\Omega q \frac{\partial v_i}{\partial x_i} d\Omega$$

$$\ell(\mathbf{v}) = \int_\Omega f_i v_i d\Omega$$

$$\ell_{div}(q) = -\int_\Omega q g(x) d\Omega \tag{2.2a-f}$$

Para que seja apresentado a versão discreta do problema serão consideradas primeiramente algumas definições necessárias em aproximações de problemas de elementos finitos. O domínio Ω é discretizado em Ne elemento finitos, tal que:

$$\overline{\Omega} = \bigcup_{e=1}^{Ne} \overline{\Omega}^e, \qquad \Omega^e \cap \Omega^f = \varnothing, \quad e \neq f$$

sendo Ω^e e Γ^e respectivamente, o interior e a fronteira do elemento e, tem-se: $\overline{\Omega}^e = \Omega^e + \Gamma^e$.

Considere $P^k(\Omega_e)$ dado por:

$P^k(\Omega_e) = \{\psi : \Omega_e \mapsto R,\ \psi$ é um polinômino de grau menor ou igual a k, em cada variável espacial$\}$

e os espaços de elementos finitos dados por:

$$H_h^k = \{\psi \in H^1, \psi_e \in P^k(\Omega_e)\}$$
$$H_h^{k,NG} = \left\{(\psi_1,\ldots,\psi_{NG}) \in \left(H^1\right)^{NG}, \psi_i \in H^k\right\}$$
$$L_h^1 = \{\psi \in L^2(\Omega), \psi_e \in P^1(\Omega_e)\}$$

onde ψ_e denota a restrição de ψ em Ω_e

Definindo ainda,

$$(S_h^k(\Omega))^{NG} = \left\{(U_h^1,\ldots,U_h^{NG}) \in H_h^{k,NG}, U_h^i = D_i \text{ em } \Gamma_D\right\}$$
$$(V_h^k(\Omega))^{NG} = \{(v_{h,1},\ldots,v_{h,NG}) \in H_h^{k,NG}, v_{h,i} = 0 \text{ em } \Gamma_D\}$$
$$W_h^1 = \left\{P^h \in L_h^1, \int_\Omega P^h d\Omega = 0\right\}$$

A formulação discreta para o problema de Stokes, pode agora ser definida por:

Determinar $\{U_h, p_h\} \in (S_h^k(\Omega))^{NG} \times W_h^1$, tal que

$$a(\mathbf{U}_h, \mathbf{v}_h) + b(p_h, \mathbf{v}_h) = \ell(\mathbf{v}_h) \quad \forall\, \mathbf{v}_h \in (V_h^k(\Omega))^{NG},$$
$$b(q_h, \mathbf{U}_h) = \ell_{div}(q_h) \quad \forall\, q_h \in W_h^1 \qquad (3a,b)$$

onde $a(\cdot,\cdot)$, $b(\cdot,\cdot)$, $\ell_{div}(\cdot)$ e $\ell(\cdot)$ são definidos em (2a-f).

O problema apresentado acima é o clássico método misto de Galerkin. Para que seja assegurada existência e unicidade do problema discreto dado acima, é necessário que a condição de Ladyzenskaya-Babuska-Brezzi (LBB) seja verificada para cada combinação dos espaços de aproximações $(V_h^k(\Omega))^{NG}$ e W_h^1. A violação da LBB acarreta a não unicidade do campo de pressões e uma degradação do campo de velocidades, ou seja, o campo de pressão pode apresentar oscilações espúrias e pode ocorrer um trancamento do campo de velocidades (velocidades iguais a zero em todo o domínio).

FORMULAÇÃO PETROV GALERKIN

Definindo, a nível de elemento:as funções,

$$\overline{p}_h^e = \frac{\int_{\Omega_e} p_h^e d\Omega}{\int_{\Omega_e} d\Omega}$$
$$\tilde{p}_h^e = p_h^e - \overline{p}_h^e$$

os espaços

$$\tilde{W}_h^1 = \left\{\tilde{Q}_h \in W_h^1, \int_{\Omega_e} \tilde{Q}_h^e d\Omega = 0\right\}$$
$$\overline{W}_h = (W_h^1 - \tilde{W}) \bigcup \{0\}$$

as formas,

$$A_{pg}^e\left((\mathbf{U}_h, \tilde{p}_h), (\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h)\right) = \delta_2(2\mu)\int_{\Omega_e} \frac{\partial U_{h,i}}{\partial x_i}\frac{\partial v_{h,j}}{\partial x_j} d\Omega +$$
$$+\frac{\delta_1 (h_e)^2}{2\mu}\int_{\Omega_e} (-2\mu \operatorname{div} \varepsilon(\mathbf{U}_h) + \nabla\tilde{p}_h)(-2\mu \operatorname{div}\varepsilon(\mathbf{v}_h) + \nabla\tilde{q}_h) d\Omega$$

onde

$$\varepsilon(\mathbf{T}_h) = \frac{(\nabla \mathbf{T}_h) + (\nabla \mathbf{T}_h)^T}{2},$$

o funcional linear

$$F_h^e(\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h) = \frac{\delta_1 (h_e)^2}{2\mu}\int_{\Omega_e} \mathbf{f}\,(-2\mu \operatorname{div} \varepsilon(\mathbf{v}_h) + \nabla\tilde{q}_h) d\Omega +$$
$$+\delta_2(2\mu)\int_\Omega g(x)\frac{\partial v_{h,j}}{\partial x_j} d\Omega$$

e os parâmetros de estabilização $\delta_1 > 0$ e $\delta_2 \geq 0$.

A formulação Petrov-Galerkin com penalização na média do divergente de $\mathbf{U}_h$ a nível de elemento consiste em:

Dados $\alpha_e > 0$ fixados, encontrar
$\left(\mathbf{U}_h(\alpha), \tilde{p}_h(\alpha), \overline{p}_h(\alpha)\right) \in (S_h^k(\Omega))^{NG} \times \tilde{W}_h^1 \times \overline{W}_h$,
$\alpha = (\alpha_1,\ldots,\alpha_{NE})$, satisfazendo a equação variacional:

$$a(\mathbf{U}_h(\alpha), \mathbf{v}_h) + b(\tilde{p}_h(\alpha), \mathbf{v}_h) +$$
$$+\sum_{\substack{e \\ e\neq 1}} \int_{\Omega_e} \left[\frac{\int_{\Omega_e} (\operatorname{div}(\mathbf{U}_h(\alpha)) - g) d\Omega}{\alpha_e \int_{\Omega_e} d\Omega} \operatorname{div} \mathbf{v}^h\right] d\Omega - b(\tilde{q}_h, \mathbf{U}_h(\alpha)) +$$

$$+\int_{\Omega_1} \tilde{p}_h^{1,J}(\alpha) \operatorname{div}\mathbf{v}_h d\Omega + \sum_e A_{pg}^e\left((\mathbf{U}_h(\alpha), \tilde{p}_h(\alpha)), (\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h)\right) =$$
$$= \ell(\mathbf{v}_h) + \sum_e F_h^e(\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h) + \sum_e \int_{\Omega_e} g\tilde{q}_h d\Omega \qquad (4a)$$

$$\forall\, (\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h) \in (V_h^k(\Omega))^{NG} \times \tilde{W}_h^1, \qquad e = 1,2,3,\ldots,NE$$

onde NE é o número total de elementos do domínio.

$$\overline{p}_h^e(\alpha) = \frac{-\int_{\Omega_e} (\operatorname{div}\mathbf{U}_h(\alpha) - g)\, d\Omega}{\alpha_e \int_{\Omega_e} d\Omega} \quad \text{se } e \neq 1, \qquad (4b)$$

$$\overline{p}_h^1(\alpha) = -\tilde{p}_h^{1,J}(\alpha), \quad \text{se } e = 1, \qquad (4c)$$

sendo

"J" um ponto nodal fixado de Ω_1,
$\overline{p}_h^1(\alpha)$ a restrição em Ω_1,
$\tilde{p}_h^{1,J}(\alpha)$ o valor de $\tilde{p}_h^1(\alpha)$ no ponto nodal "J" e
$\tilde{p}_h^1(\alpha)$ a restrição de $\tilde{p}_h(\alpha)$ em Ω_1.

Definindo as formas:

$$A^\alpha\left((\mathbf{U}, \tilde{p}), (\mathbf{v}, \tilde{q})\right) = a(\mathbf{U}, \mathbf{v}) + b(\tilde{p}, \mathbf{v}) - b(\tilde{q}, \mathbf{U}) +$$
$$+\sum_{\substack{e \\ e\neq 1}} \int_{\Omega_e} \left[\frac{\int_{\Omega_e} \operatorname{div}(\mathbf{U})\, d\Omega}{\alpha_e \int_{\Omega_e} d\Omega} \int \operatorname{div}(\mathbf{v}) d\Omega\right] d\Omega +$$
$$\int_{\Omega_1} \tilde{p}_h^{1,J} \operatorname{div}(\mathbf{v})\, d\Omega + \sum_e A_{pg}^e\left((\mathbf{U}, \tilde{p}), (\mathbf{v}, \tilde{q})\right) \qquad (5a)$$

$$\tilde{\ell}(\mathbf{v}, g, \alpha) = \sum_{\substack{e \\ e\neq 1}} \left\{\int_{\Omega_e} \left[\frac{\int_{\Omega_e} g\, d\Omega}{\alpha_e \int_{\Omega_e} d\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{v})\right] d\Omega\right\} \qquad (5b)$$

$$B^\alpha(\mathbf{v}, \tilde{q}) = \ell(\mathbf{v}) + \tilde{\ell}(\mathbf{v}, g, \alpha) + \sum_e F_e^h(\mathbf{v}, \tilde{q}) + \sum_e \int_{\Omega_e} g\tilde{q}\, d\Omega$$
$$(5c)$$

o problema dado por (4a,b,c) pode ser dado, de forma equivalente, por:

$$A^{\alpha}((\mathbf{U}_h(\alpha),\tilde{p}_h(\alpha)),(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)) = B^{\alpha}(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h) \qquad (6a)$$

$$\forall(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l,$$

$$(\mathbf{U}_h(\alpha),\tilde{p}_h(\alpha))\in\left(S_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$$

e = 1,2,3,...,NE onde NE é o número total de elementos do domínio.

Os principais resultados do presente trabalho seguem: **Lema 1** e os teoremas **T1** a **T9.** As provas desses resultados podem ser encontradas em Dos Santos,L.C.C. (1996) ou em Traiano, F.M.L. (1996).

Lema 1 Existe $C_M>0$ tal que:

$$\int_{\Omega_l}\left(\tilde{p}^{l,J}\right)^2 d\Omega \le C_M\int_{\Omega_l}(\tilde{p}^l)^2 d\Omega \qquad (7a)$$

$$\tilde{p}^l \in P^l(\Omega_l),$$

$$\int_{\Omega_l}\tilde{p}^l d\Omega = 0.$$

Introduzindo em $\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$ um produto interno e norma dados, respectivamente por:

$$((\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h),(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h))_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha} = \sigma_1\, a(\mathbf{U}_h,\mathbf{v}_h)+$$

$$+\sigma_2(2\mu)\int_{\Omega}\mathrm{div}\mathbf{U}_h\mathrm{div}\mathbf{v}_h d\Omega+$$

$$+\frac{\sigma_3}{2\mu}\sum_e\left\{(h^e)^2\int_{\Omega_e}\left[-2\mu\,\mathrm{div}(\varepsilon(\mathbf{v}_h))\right]\left[-2\mu\,\mathrm{div}(\varepsilon(\mathbf{v}_h))\right]d\Omega\right\}$$

$$+\sigma_4\frac{\tilde{C}_p}{2\mu}\sum_e\int_{\Omega_e}\tilde{p}_h^e\tilde{q}_h^e d\Omega+\sum_{\substack{e\\ e\neq l}}\frac{\left(\int_{\Omega_e}\mathrm{div}\mathbf{U}_h d\Omega\right)\left(\int_{\Omega_e}\mathrm{div}\,\mathbf{v}_h d\Omega\right)}{\alpha_e\int_{\Omega_e}d\Omega}$$

$$\|(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha} = \left\{((\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h),(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h))_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha}\right\}^{1/2} \qquad (8a,b)$$

e portanto $\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$ é um espaço de Hilbert com produto interno dado por (8a).

Considere $\mathbf{Y}_h\in\left(S_h^k(\Omega)\right)^{NG}$ e $(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$ sendo a solução da seguinte equação variacional:

$$A^{\alpha}((\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h),(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)) = B^{\alpha}(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h) - A^{\alpha}((\mathbf{Y}_h,0),(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)) \qquad (9a)$$

$$\forall(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$$

$$(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$$

(T1) Elipticidade de A^{α}

Existem $C^{el}>0$, σ_i (i = 1,2,3,4), δ_j (j = 1,2,3) tais que:

$$A^{\alpha}((\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h),(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)) \ge C^{el}\left(\|(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha}\right) \qquad (10a)$$

$$\forall(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$$

(T2) Continuidade de A^{α}

Para σ_i (i = 1,2,3,4), δ_j (j = 1,2,3) adequados, existe $C^{cont}>0$ tal que:

$$A^{\alpha}((\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h),(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)) \le$$

$$\le C^{cont}\left(\|(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha}\right)\left(\|(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha}\right) \qquad (11a)$$

$$\forall(\mathbf{U}_h,\tilde{p}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l \quad \text{e}$$

$$\forall(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\in\left(V_h^k(\Omega)\right)^{NG}\times\tilde{W}_h^l$$

(T3) Unicidade do problema

Se o problema dado por (6a) tem uma solução, então ela é única.

(T4) Limitação da forma linear do problema auxiliar

$$\sup_{\substack{(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\in V_h^k(\Omega)\times\tilde{W}_h^l\\ (\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\neq(0,0)}}\frac{|B^{\alpha}(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)|+|A^{\alpha}((\mathbf{Y}_h,0),(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h))|}{\|(\mathbf{v}_h,\tilde{q}_h)\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,\alpha}}<\infty \qquad (12a)$$

(T5) Existência e unicidade da solução do problema auxiliar

Existe uma e somente uma solução do problema dado por (9a)

(T6) Existência e unicidade da solução do problema

Existe uma e somente uma solução do problema variacional dado por (6a)

(T7) Se $(\mathbf{U},\tilde{p},\overline{p})$ é a solução do problema de Stokes modificado, $(\mathbf{U}_h^l,\tilde{p}_h^l,\overline{p}_h^l)$ seu interpolante e $(\mathbf{U}_h(\alpha),\tilde{p}_h(\alpha),\overline{p}_h(\alpha))$ é a solução do problema dado por (6a) então existe $C_{LBB}>0$ tal que:

$$\left(\|\overline{p}-\overline{p}_h(\alpha)\|_0\right)^2 \le$$

$$\le C_L^0\left(\|(\mathbf{U}_h^l-\mathbf{U}_h(\alpha),\tilde{p}_h^l-\tilde{p}_h(\alpha),\overline{p}_h^l-\overline{p}_h(\alpha))\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,0}\right)^2+$$

$$+C_L^1\,h^{2k}\left(\|\mathbf{U}\|_{k+1,NG}\right)^2+C_L^2h^{2(l+1)}\left(\|\tilde{p}+\overline{p}\|_{l+1}\right)^2 \qquad (13a)$$

(T8) Se $(\mathbf{U},\tilde{p},\overline{p})$ é a solução do problema de Stokes modificado, $(\mathbf{U}_h^l,\tilde{p}_h^l,\overline{p}_h^l)$ seu interpolante e $(\mathbf{U}_h(\alpha),\tilde{p}_h(\alpha),\overline{p}_h(\alpha))$ é a solução do problema dado por (6a) então existe $\alpha_{max}^c>0$ tal que, se $\alpha_e<\alpha_{max}$, existem $C_N^1>0$ e $C_N^2>0$ tais que:

$$\left(\left\|(\mathbf{U}_h^l - \mathbf{U}_h(\alpha), \tilde{p}_h^l - \tilde{p}_h(\alpha))\right\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,0}\right)^2 \leq$$
$$\leq C_N^1\, h^{2k}\left(\|\mathbf{U}\|_{k+1,NG}\right)^2 + C_N^2\, h^{2(l+1)}\left(\|\tilde{p}+\overline{p}\|_{l+1}\right)^2 +$$
$$+\sum_{\substack{c\\ c\neq l}} \alpha_c \int_{\Omega_c} (\overline{p})^2 d\Omega \qquad (14a)$$

(T9) Estimativa de erro para solução do problema
Se $\alpha_c < \alpha_{max}^c$ $(\alpha_{max}^c > 0)$ então,

$$\left(\|\overline{p} - \overline{p}_h(\alpha)\|_0\right)^2 + \left(\left\|(\mathbf{U} - \mathbf{U}_h(\alpha), \tilde{p} - \tilde{p}_h(\alpha))\right\|_{\sigma_1,\sigma_2}^{\sigma_3,\sigma_4,0}\right)^2 \leq$$
$$C_j^1\, h^{2k}\left(\|\mathbf{U}\|_{k+1,NG}\right)^2 + C_j^2\, h^{2(l+1)}\left(\|\tilde{p}+\overline{p}\|_{l+1}\right)^2$$
$$+C_j^3 \sum_{\substack{c\\ c\neq l}} \alpha_c \int_{\Omega_c} (\overline{p})^2 d\Omega \qquad (15a)$$

Portanto, afim de manter a ordem de aproximação, devemos escolher "α_e" $(e\neq l)$ satisfazendo:

$$\alpha_c = \mathrm{Min}\left\{\overline{\alpha}_c\, h^r, \frac{\alpha_{max}^c}{2}\right\},$$
$$r = \mathrm{Min}\{2k, 2(l+1)\},$$
$$0 < \overline{\alpha}_c < 1$$

CONCLUSÕES

É apresentada uma formulação mista Petrov-Galerkin que agrega a formulação de Karam (1989) a possibilidade de eliminação total da pressão a nível de elemento utilizando uma penalização diferenciada por elemento da média do divergente do campo de velocidade a nível de elemento. São apresentados resultados de existência e unicidade para o problema modificadode Stokes. É formalizado o procedimento prático de prescrever um valor nulo da pressão em um ponto ao invés de forçar sua média nula de forma global. As estimativas de taxas de convergência confirmam que quando o máximo parâmetro de penalização tende a zero, a formulação apresentada tende para Karam (1989).

SUGESTÕES

Perspectivas futuras deste trabalho consistem no desenvolvimento de uma metodologia para a determinação ótima dos α^c e na análise numérica para o problema de Oseen (Navier-Stokes linearizado).

ABSTRACT

A primitive-variable Petrov-Galerkin formulation for incompressible flows, based on Karam (1989), is presented. This formulation is accommodate equal order of interpolation for pressure and velocity. The main contribution over Karam (1989) is the possibility to fully eliminate the total pressure at the element level using a diferentiated "penalty" per element over the average divergent of the velocity field at element level. Results for existtency and unicity of the discrete formulation of the modified Stokes problem are presented, as well estimatives of the rate of convergence confirming when the maximum parameter of the penalization tends to zero the present formulation tends to Karam (1989).

REFERÊNCIAS

ANDERSON, D. A. (1984), *Computacional Fluid Mechanics and Heat Transfer*, McGraw-Hill

BABUSKA, I. (1971), *Error Bounds for the Finite Element Method*, Numerische Mathematik, Vol 16, pp 322-333.

BREZZI, F. (1974), *On the Existence, Uniqueness and Approximation of Saddle-Point Problems Arising from Lagrange Multipliers*, Revue Française d'Automatique Infomatique et Recherche Opérationnelle, Ser. Rouge Anal. Numér, Vol 8, R-2, pp 129-151.

CERQUEIRA DE ALMEIDA, R. C. (1993), *Uma Formulação de Petrov-Galerkin para a Resolução das Equações de Euler e Navier-Stokes Compressível Usando Técnicas Adaptativas*, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ.

DOS SANTOS, L. C. C. (1996), *Uma Formulação Petrov-Galerkin para escoamentos incompressíveis*, Tese de Mestrado, PEM/COPPE/UFRJ.

FRANCA, L.P. and FREY, S. L. (1992), *Stabilized Finite Element Methods: II. The Incompressible Navier-Stokes Equations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol 99, pp 209-233.

KARAM FILHO, J. (1989), *Uma Nova Formulação de Elementos Finitos para Escoamentos Incompressíveis*, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ.

MALKUS, D.S. and HUGHES, T.J.R. (1978), *Mixed Finite Element Methods Reduced and Selective Integration: A Unification of Concepts*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol 15, pp 63-81.

PATANKAR, S. V. (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill

TRAIANO, F. M. L. (1996), *Simulação Numérica do escoamento bidimensional usando uma formulação Petrov-Galerkin*, Tese de Mestrado PEM/COPPE/UFRJ

NOVAS FORMULAÇÕES PETROV-GALERKIN PARA ESCOAMENTOS INCOMPRESSÍVEIS. PARTE II: RESULTADOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA MODIFICADO DE STOKES.

Do Carmo, E. G. D.
Programa de Engenharia Nuclear - COPPE/UFRJ
Traiano, F. M. L. e Dos Santos, L. C. C.
Programa de Engenharia Mecânica - COPPE/UFRJ
CP. 68.503, Rio de Janeiro - RJ, 21.945-970 Brasil

RESUMO

Uma formulação Petrov-Galerkin em variáveis primitivas para escoamentos incompressíveis apresentada na Parte I a qual permite espaços de interpolação de mesma ordem para o campo de pressão e velocidade, com pressão descontinua e velocidade continua com total eliminação da presão a nível de elemento através de uma penalização diferenciada por elemento da média do divergente do campo de velocidade a nível de elemento é aplicada na solução do problema modificado de Stokes. Os resultados numéricos apresentados atestam claramente as boas propriedades de estabilidade e precisão da formulação desenvolvida.

INTRODUÇÃO

Normalmente a validação de uma nova formulação numérica passa por duas etapas, onde em ambas as etapas compara-se a solução numérica calculada com a solução exata do problema suposta conhecida. Na primeira etapa resolve-se um grande número de problemas normalmente em geometrias complexas e com a utilização de malhas relativamente grosseiras, fixas e uniformes de forma a confirmar as características de precisão e estabilidade da nova formulação numérica. Na segunda etapa é resolvido um número menor de problemas geralmente em geometrias simples, porém com diferentes resoluções de malha de forma a confirmar as taxas de convergência obtidas através da análise numérica do método. O objetivo do presente trabalho é tratar da primeira etapa de validação numérica para a formulação desenvolvida na parte I, restando a segunda etapa para trabalhos futuros. A forma mais simples de se obter um problema com solução exata conhecida em uma geometria de sua escolha, a qual é utilizada no presente trabalho, é a seguinte: dada uma função que satisfaça a regularidade mínima de uma solução da classe de problemas em estudo sobre o domínio escolhido, aplica-se o operador da classe de problemas em estudo sobre esta função para produzir os termos fontes do problema específico e estende-se esta função ao contorno do domínio escolhido de forma a obter as condições de contono do problema específico. Desta forma obtém-se um problema de Dirichlet sobre um domínio de sua escolha com solução exata conhecida. São apresentados resultados para dois problemas com soluções analíticas conhecidas e para o problema da cavidade. O problema da cavidade foi escolhido para termos uma base de comparação com o trabalho de Karam (1989), os outros dois problemas com solução exata foram "fabricados" através da metodologia descrita acima sobre o domínio do problema da cavidade. Os resultados obtidos confirmam as boas caracteristicas de precisão e estabilidade da formulação apresentada na parte I, que é revista de forma resumida a seguir.

FORMULAÇÃO PETROV GALERKIN

A formulação Petrov-Galerkin com penalização na média do divergente de $\mathbf{U}_h$ a nível de elemento consiste em:

Dados $\alpha_e > 0$ fixados, encontrar

$$\left(\mathbf{U}_h(\alpha), \tilde{p}_h(\alpha), \bar{p}_h(\alpha)\right) \in (S_h^k(\Omega))^{NG} \times \tilde{W}_h^1 \times \overline{W}_h,$$

$\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_{NE})$, satisfazendo a equação variacional:

$$a(\mathbf{U}_h(\alpha), \mathbf{v}_h) + b(\tilde{p}_h(\alpha), \mathbf{v}_h) +$$

$$+\sum_{\substack{e \\ e\neq 1}} \int_{\Omega_e} \left[\frac{\int_{\Omega_e} (\operatorname{div}(\mathbf{U}_h(\alpha)) - g) d\Omega}{\alpha_e \int_{\Omega_e} d\Omega} \operatorname{div} \mathbf{v}^h \right] d\Omega - b(\tilde{q}_h, \mathbf{U}_h(\alpha)) +$$

$$+\int_{\Omega_1} \tilde{p}_h^{1,J}(\alpha) \operatorname{div} \mathbf{v}_h d\Omega + \sum_e A_{pg}^e\left((\mathbf{U}_h(\alpha), \tilde{p}_h(\alpha)), (\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h)\right) =$$

$$= \ell(\mathbf{v}_h) + \sum_e F_h^e(\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h) + \sum_e \int_{\Omega_e} g \tilde{q}_h d\Omega$$

$$\forall (\mathbf{v}_h, \tilde{q}_h) \in (V_h^k(\Omega))^{NG} \times \tilde{W}_h^1, \qquad e = 1,2,3,\ldots,NE$$

onde NE é o número total de elementos do domínio.

$$\bar{p}_h^e(\alpha) = \frac{-\int_{\Omega_e} (\operatorname{div}\mathbf{U}_h(\alpha) - g)\, d\Omega}{\alpha_e \int_{\Omega_e} d\Omega} \qquad \text{se } e \neq 1$$

$$\bar{p}_h^1(\alpha) = -\tilde{p}_h^{1,J}(\alpha), \qquad \text{se } e = 1$$

sendo

"J" um ponto nodal fixado de Ω_1,

$\bar{p}_h^1(\alpha)$ a restrição em Ω_1,

$\tilde{p}_h^{1,J}(\alpha)$ o valor de $\tilde{p}_h^1(\alpha)$ no ponto nodal "J" e

$\tilde{p}_h^1(\alpha)$ a restrição de $\tilde{p}_h(\alpha)$ em Ω_1.

RESULTADOS

São apresentados os resultados numéricos obtidos quando da aplicação da metodologia desenvolvida na parte I a três exemplos numéricos: dois problemas com solução exata conhecida e ao clássico problema da cavidade.Todos os problemas apresentam viscosidade unitária e termos fontes nulos(μ=1.0, $g(x)=f_i(x)$=0.0).Os exemplos foram executados em micro-computador 486DX2-66, sobre o sistema operacional OS/2, com a utilização do compilador WATCOM C\C++. Foram utilizadas malhas bidimensionais uniformes de elementos finitos com 16 elementos quadriláteros bilineares(com 2x2 pontos de integração de Gauss) em cada direção e o sistema de equações lineares resultante foi resolvido através de um solver direto do tipo frontal(Berry (1991)).O tempo médio de execução de cada exemplo foi de dezoito segundos(incluindo todo o tempo de execução do programa e entrada e saída). Foram utilizados, a menos que se diga explicitamente o contrário os seguintes valores para os parâmetros de estabilização e penalização: $\delta_1 = 1.0, \delta_2 = 0.0$, $\overline{\alpha}_c = \overline{\alpha} = 1.0E-5$. Devido a utilização de pressão descontinua obtemos mais de um valor de pressão para cada nó, de forma que devemos utilizar alguma técnica de pós-processamento de forma a obter um campo de pressão continuo para a apresentação gráfica. Em virtude da limitação de tempo foi utilizada a técnica de pós-processamento mais rudimentar possível para a pressão, que é a média aritmética dos valores da pressão(interpolada de forma descontínua) incidentes em cada nó de forma a obter um campo de pressão continuo como resultado final. Tal técnica é muito deficiente por não considerar os aspectos da discretização do problema.

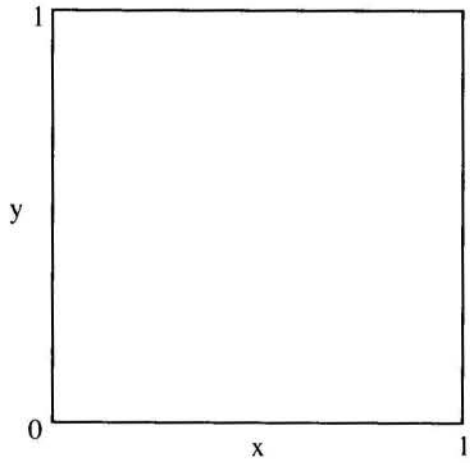


figura 1: Geometria dos problemas

(PE1) - Problema Exato 1

-condições de contorno

$U(X,0)=X/2 \quad V(X,0)=X^2/2$

$U(0,Y)=Y/2 \quad V(0,Y)=-Y/2$

$U(X,1)=(X+1)/2 \quad V(X,1)=-1/2+X^2/2$

$U(1,Y)=(1+Y)/2 \quad V(1,Y)=-Y/2+1/2$

-solução exata

$U(X,Y)=(X+Y)/2$ (max. desvio 5E-7)

$V(X,Y)=-Y/2+X^2/2$ (max. desvio 5E-7)

$p(X,Y)=Y$ (max. desvio 0.2)

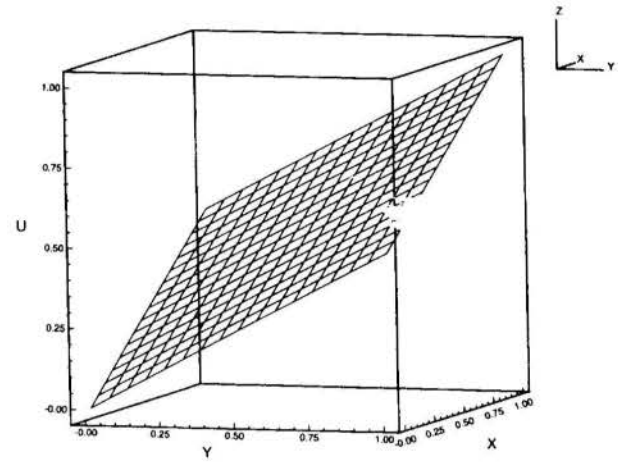


figura 2: Componente U do campo de velocidade (PE1)

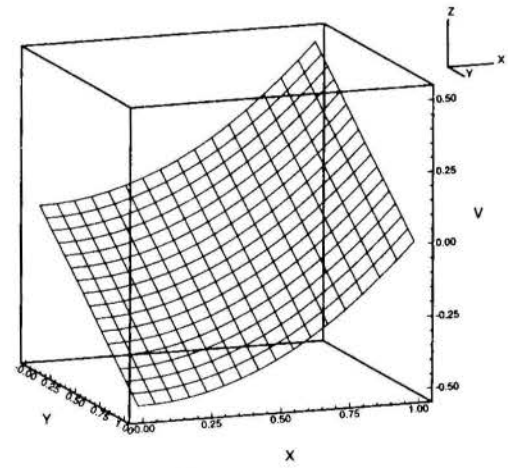


figura 3: Componente V do campo de velocidade (PE1)

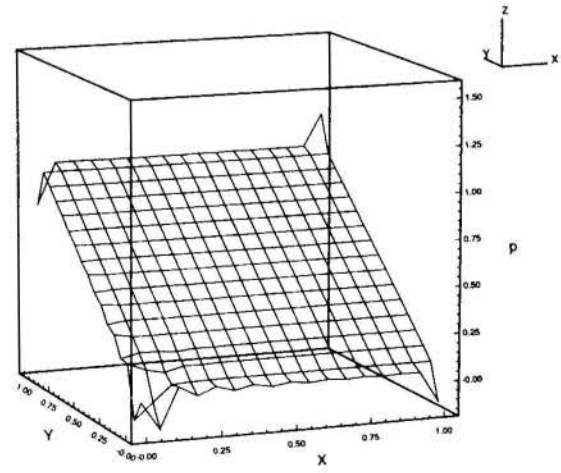


figura 4: Campo de pressão (PE1)

(PE2) - Problema Exato 2

-condições de contorno

$U(X,0)=0.0 \quad V(X,0)=-X^2/2+X^3/6$

$U(0,Y)=Y^3/6 \quad V(0,Y)=Y^2/2$

$U(X,1)=-X+1/2 \quad V(X,1)=1/2-X^2/2+X^3/6$

$U(1,Y)=Y^3/6-Y/2 \quad V(1,Y)=Y^2/2-1/2+1/6$

-solução exata

$U(X,Y)=-XY+Y^3/6$ (max. desvio 5E-7)

$V(X,Y)=Y^2/2-X^2/2+X^3/6$ (max. desvio 5E-7)

$p(X,Y)=XY$ (max. desvio 0.1)

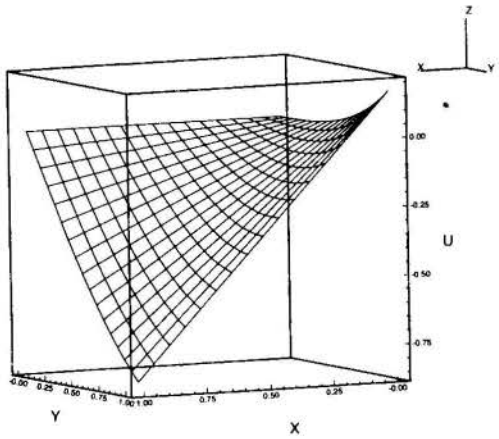


figura 5: Componente U do campo de velocidade (PE2)

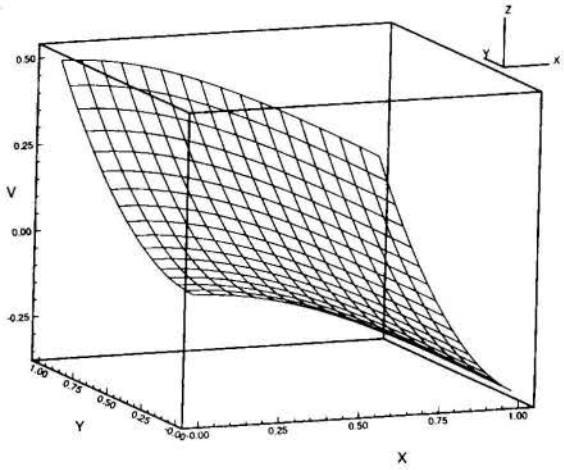


figura 6: Componente V do campo de velocidade (PE2)

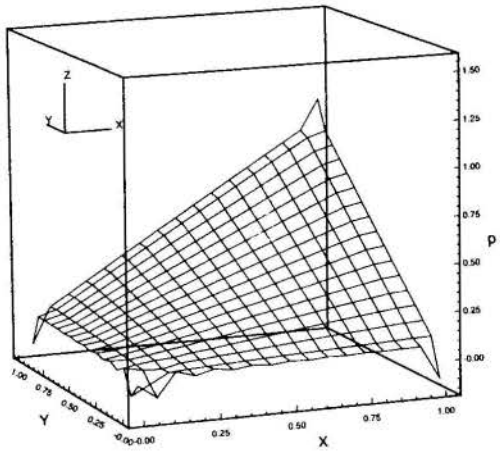


figura 7: Campo de pressão (PE2)

(PC) - Problema da Cavidade

-condições de contorno

$U(X,0)=0.0 \quad V(X,0)=0.0$

$U(0,Y)=0.0 \quad V(0,Y)=0.0$

$U(X,1)=1.0 \quad V(X,1)=0.0$

$U(1,Y)=0.0 \quad V(1,Y)=0.0$

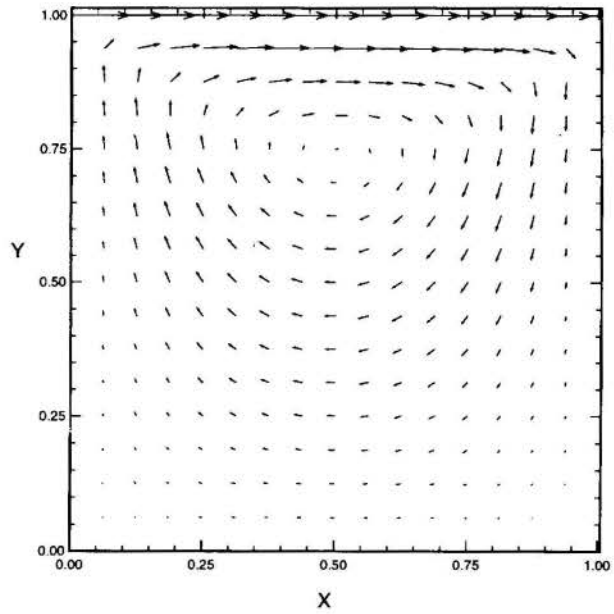


figura 8: Campo de velocidade (PC)

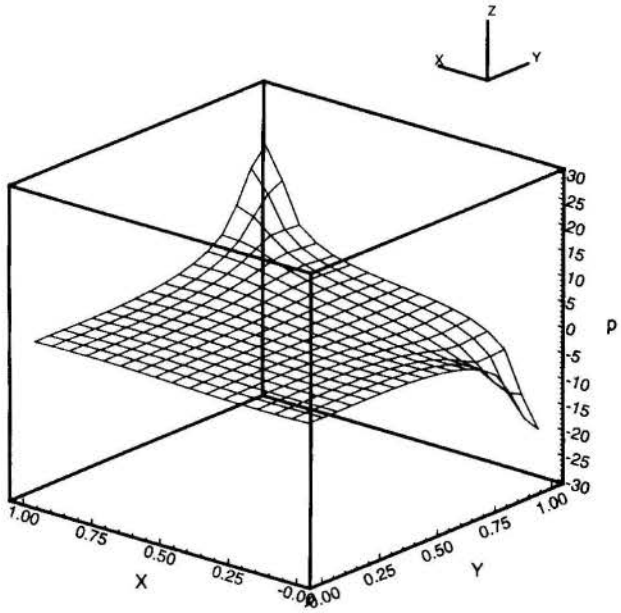


figura 9: Campo de pressão (PC)

PNPC - Patologias Numéricas do Problema da Cavidade
δ_1 = 10E-5

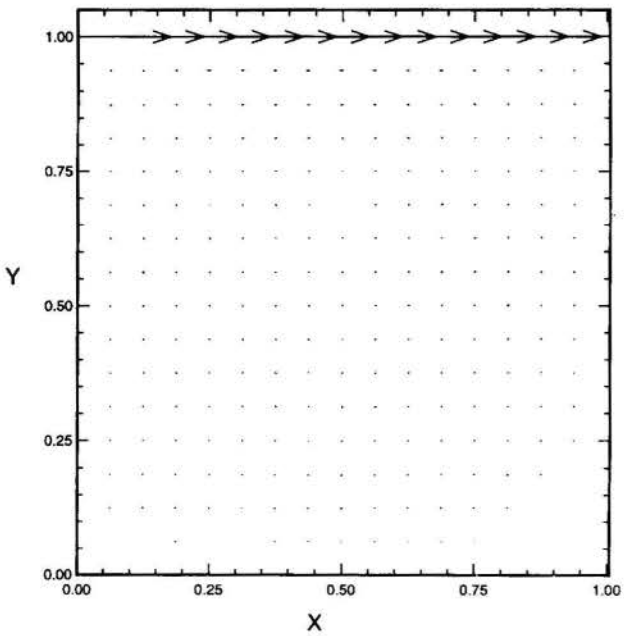


figura 10: Trancamento do campo de velocidades (PNPC)

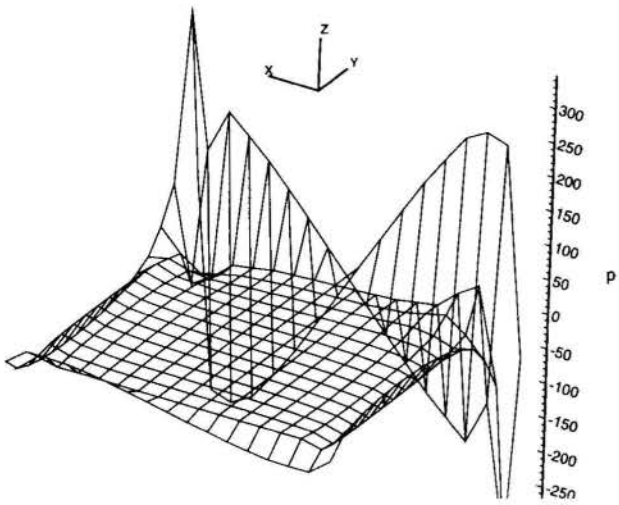


figura 11: Oscilações espúrias do campo de velocidades (PNPC)

CONCLUSÕES

Uma formulação Petrov-Galerkin para escoamentos incompressíveis descrita na parte I é aplicada na solução do problema modificado de Stokes. São apresentados resultados relativos a dois problemas com solução analítica conhecida na forma de gráficos de elevação para as duas componentes do campo de velocidade e para o campo de pressão nas figuras 2 a 4 e 5 a 7, respectivamente. Observa-se uma ótima concordância para o campo de velocidade e uma boa concodância para o campo de pressão com pequenas imperfeições no contorno especialmente nos cantos. Tais imperfeições são aqui atribuidas a precária técnica de pós-processamento utilizada para o campo de pressão, a utilização de uma suavização no senso dos mínimos quadrados como descrita em Karam (1989) elimina completamente estas imperfeições. Nas figuras 8 e 9 são apresentados respectivamente o gráfico vetorial do campo de velocidade e a elevação do campo de pressão para o problema da cavidade. Tais resultados são mostrados a título de comparação com Karam(1989) apresentando boa concordância, em especial a pressão não a presenta imperfeições no contorno neste caso. Foi feita para este mesmo problema da cavidade uma simulação da fomulação mista de Galerkin clássica fazendo o parâmetro δ_1 tender a zero, recuperando-se as patologias numéricas típicas nesta situação com trancamento do campo de velocidade e oscilações espúrias do campo de pressão, como pode ser observado nas figuras 10 e 11 respectivamente.

SUGESTÕES

- introduzir um suavizador de tensões no senso dos mínimos quadrados como descrito em Karam (1989)
- ativar o parâmetro de estabilização $\delta 2$ e estudar sua influência na precisão do campo de velocidade, especialmente em elementos de ordem superior
- estudar a influência do majorante dos parâmetros de penalização no número de condicionamento da matriz do sistema de equações lineares a ser resolvido, vislumbrando a possibilidade de utilização de solvers iterativos para este fim
- análise sistemática para confirmação das taxas de convergência.

ABSTRACT

A primitive-variable Petrov-Galerkin formulation for incompressible flows, based on Karam (1989), presented in the part I is aplied in the solution of the modified Stokes problem. This formulation accommodates equal order of interpolation for pressure and velocity, with discontinuos pressure and continuos velocity. The main contribution over Karam (1989) is the possibility to fully eliminate the total pressure at the element level using a diferentiated "penalty" per element over the average divergent of the velocity field at element level. The numerical results presented clear shows the good properties of stability and precision of the developed formulation.

REFERÊNCIAS

ANDERSON, D. A. (1984), *Computacional Fluid Mechanics and Heat Transfer*, McGraw-Hill

BABUSKA, I. (1971), *Error Bounds for the Finite Element Method*, Numerische Mathematik, Vol 16, pp 322-333.

BERRY, K. J. (1991), *An Efficient C-Based Wavefront Solver for PC Finite Element Applications*, Computer and Structures, Vol 39, No 3/4, pp 303-315.

BREZZI, F. (1974), *On the Existence, Uniqueness and Approximation of Saddle-Point Problems Arising from Lagrange Multipliers*, Revue Française d'Automatique Infomatique et Recherche Opérationnelle, Ser. Rouge Anal. Numér, Vol 8, R-2, pp 129-151.

CERQUEIRA DE ALMEIDA, R. C. (1993), *Uma Formulação de Petrov-Galerkin para a Resolução das Equações de Euler e Navier-Stokes Compressível Usando Técnicas Adaptativas*, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ.

DOS SANTOS, L. C. C. (1996), *Uma Formulação Petrov-Galerkin para escoamentos incompressíveis,* Tese de Mestrado, PEM/COPPE/UFRJ.

FRANCA, L.P. and FREY, S. L. (1992), *Stabilized Finite Element Methods: II. The Incompressible Navier-Stokes Equations*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol 99, pp 209-233.

KARAM FILHO, J. (1989), *Uma Nova Formulação de Elementos Finitos para Escoamentos Incompressíveis*, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ.

MALKUS, D.S. and HUGHES, T.J.R. (1978), *Mixed Finite Element Methods Reduced and Selective Integration: A Unification of Concepts*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol 15, pp 63-81.

PATANKAR, S. V. (1980), *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill

TRAIANO, F. M. L. (1996), *Simulação Numérica do escoamento bidimensional usando uma formulação Petrov-Galerkin,* Tese de Mestrado PEM/COPPE/UFRJ

DESENVOLVIMENTO DE ALGORITMO DE SUB-ESTRUTURAÇÃO PARA ELEMENTOS FINITOS

Philippe R. B. Devloo e Misael L. M. Santana
Faculdade de Engenharia Civil
UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas
CP 6021 CEP 13081-970 Campinas - SP - Brasil

SUMÁRIO

Este artigo descreve a implementação da técnica de sub-estruturação no contexto da filosofia de programação orientada para objetos. Descrevemos primeiro o ambiente PZ orientado a objetos, para desenvolvimento de algoritmos de elementos finitos, e em seguida as classes que permitem a implementação da técnica da sub-estruturação. Resultado deste esforço está um ambiente que permite ao usuário aplicar a técnica de sub-estruturação a qualquer cálculo de elementos finitos

INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é a implementação eficiente e versátil do método de sub-estruturação dentro de um programa de elementos finitos. Além da capacidade de sub-estruturação, o programa terá a capacidade de dividir uma malha grande de elementos finitos em sub-domínios.

A sub-estruturação forma a base da maioria dos algoritmos paralelos para resolução de sistemas de elementos finitos. Após dividir o domínio em sub-domínios, estes mesmos são distribuídos entre os processadores. No processo de resolução do sistema, o máximo de cálculos é feito sobre os sub-domínios, comunicando dados apenas pela interface. O desafio da computação paralela em elementos finitos consiste em calcular a solução do problema global com o mínimo de comunicação entre os sub-domínios.

Uma das primeiras aplicações da sub-estruturação encontra-se na área de análise dinâmica. Tendo em vista o custo proibitivo de calcular autovalores de grandes sistemas esparsos de equações, recorre-se a técnica de sub-estruturação, onde os vários componentes estruturais são representados por apenas alguns modos de ressonância. A terminologia de sub-estruturação tem sua origem na análise dinâmica de estruturas.

Finalmente, notamos que a técnica de condensação de equações por sub-domínios é um método muito eficiente para resolução de sistemas de equações lineares. Os algoritmos implementados neste trabalho assemelham-se a resoluções multi-frontais de sistemas de equações. Para certa topologia de domínio, a técnica multi-frontal é a mais eficiente, mesmo implementada em um único processador.

Neste trabalho, a técnica de sub-estruturação é implementada pela criação da classe *TSuperEl* que é simultaneamente derivada da classe *TCompGrid* (malha computacional) e *TCompEl* (elemento computacional). Assim, qualquer objeto do tipo *TSuperEl* implementa ao mesmo tempo o comportamento de um elemento e o comportamento de uma malha. Dentro da malha à qual pertence o objeto, não é diferenciado de qualquer outro elemento da malha. A estrutura permite que super-elementos contenham outros super-elementos. A implementação da classe *TSuperEl* depende fortemente da implementação da classe *TMatRed*. Esta classe é derivada da classe *TMatrix* e permite a definição de dois conjuntos de equações. O primeiro conjunto pode ser condensado sobre o segundo.

Na primeira seção do texto descrevemos o ambiente PZ. orientado para objetos para desenvolvimento de algoritmos de elementos finitos. Na segunda seção descrevemos o conjunto de classes do tipo matriz utilizado pelo ambiente PZ e, em particular, a classe *TMatRed* que facilitou a implementação da técnica de sub-estruturação. A terceira seção descreve a classe *TSuperEl*. A quarta seção apresenta as conclusões do trabalho e metas para desenvolvimentos futuros.

UM AMBIENTE ORIENTADO PARA OBJETOS PARA DESENVOLVIMENTO DE PROGRAMAS DE ELEMENTOS FINITOS

A filosofia de programação orientada para objetos permite atingir um alto nível de abstração no desenvolvimento de programas. Principalmente o conceito de classe, que une dados e operações realizadas sobre os mesmos, permite a introdução de novos tipos de dados. No ambiente apresentado, esses tipos são derivados de conceitos vindo da definição do método de elementos finitos. Definimos o tipo malha, elemento, nó e material e associamos neles operações naturais. Nosso objetivo é o desenvolvimento de uma estrutura de classes que permita simular um máximo de problemas de mecânica computacional e incorporar a maioria de algoritmos de elementos finitos (inclusive adaptatividade e paralelismo), sem tornar o programa necessariamente ineficiente. O ambiente contém, neste estágio do projeto, elementos uni-dimensionais e bi-dimensionais triangulares e quadrilaterais. As interpolações são de ordem arbitrária, utilizando-se funções hierarquicas de interpolação. Os modelos implementados são treliças tri-dimensionais, pórticos bi-dimensionais, problema de poisson, elasticidade bi-dimensional e escoamento em meios porosos com interação entre a pressão nos poros e deformação elástica da rocha. Qualquer sistema de equações bi-dimensional linear pode ser facilmente incorporado.

Estrutura de classes do ambiente de elementos finitos. Um ambiente orientado a objetos apresenta-se ao usuário como um conjunto de classes. Este conjunto de classes deve seguir uma filosofia de resolução de problemas tal que o usuário

familiarizado com o ambiente procure a classe que resolva um dado problema.

Na definição da aproximação de uma equação diferencial, distinguimos três itens : a definição da geometria do domínio, o espaço de interpolação e a definição dos coeficientes da equação diferencial e/ou condição de contorno. O ambiente PZ contém três principais conjuntos de classes com finalidades distintas: classes para aproximação da geometria do problema, classes para definição do espaço de interpolação e classes para definição da(s) equação(ões) diferencial(ais) e as condições de contorno.

Aproximação da geometria do problema. O domínio da equação diferencial é discretizado por elementos finitos. Cada elemento define um espaço parametrizado uni- bi- ou tri-dimensional. Esta parametrização é expressa por um mapeamento entre a configuração no domínio (configuração deformada) e um *elemento mestre*. Este mapeamento é definido por funções de interpolação lagrangeanas lineares e quadráticas. Estudamos a incorporação de elementos onde o mapeamento de cada lado pode ser definido por um mapeamento uni-dimensional arbitrário. A classe principal da aproximação da geometria é a classe *TGeoGrid*.

* TGeoGrid : É um conjunto de elementos e nós geométricos que definem a geometria da aproximação do domínio da equação diferencial. Nota-se que, caso a malha seja refinada de modo adaptativo, o elemento mãe e seus sub-elementos estão incluídos na lista dos elementos.
  - Proporciona ao usuário a lista de elementos geométricos e a lista de nós geométricos.
  - Inclui método para cálculo da vizinhança dos elementos.

Supõe-se que várias aproximações podem ser feitas baseadas em uma único malha geométrica. Este seria o caso de algoritmos adaptativos onde a seqüência de malhas são armazenadas separadamente.

* TGeoEl : Define o mapeamento entre o elemento deformado e o elemento mestre. O elemento geométrico inclui também um dados para definição do número de referência do material e, caso o elemento esteja localizado na fronteira, o número de referência da condição de contorno. Outros dados do elemento geométrico são : vizinhos do elemento e/o número de condição de contorno e números de referência do pai e filhos do elemento. Os principais métodos são :
  - Método para cálculo do Jacobiano do mapeamento
  - Método para dividir o elemento em sub-elementos
  - Método para criação de um elemento computaçional baseado no elemento geométrico atual

Derivadas da classe *TGeoEl* são *TGeoEl1d*, *TGeoElQ2d* e *TGeoElT2d*, que implementam o elemento geométrico uni-dimensional, quadrilátero bi-dimensional e triângulo bi-dimensional, respectivamente.

* *TGeoNod* : Define o nó geométrico. Contém as coordenadas de um nó no espaço tri dimensional e um ponteiro para um sistema de coordenadas.

<u>Definição do espaço de aproximação</u>. A distinção entre o método de elementos finitos e a aproximação de Rayleigh Ritz é a forma sistemática com que o método de elementos finitos define as funções de interpolação. No ambiente proposto, as funções de interpolação são definidas com base em polinômios ortogonais. Isto significa que as funções de interpolação são efetivamente dissociadas das funções de mapeamento. Utilizando a nomenclatura usual do método de elementos finitos, não temos nem elementos iso-paramêtricos o sub-paramêtricos. Chamamos os elementos e nós computacionais, os elementos e nós sobre os quais são definidos as funções de interpolação. A cada elemento computacional, associamos um elemento geométrico. O elemento geométrico calcula o mapeamento entre o elemento deformado e o elemento mestre. e o elemento computacional calcula as funções de forma e suas derivadas nos pontos de integração : o elemento computacional utiliza a informação do elemento geométrico para calcular a matriz de rigidez do elemento. A classe fundamental do espaço de aproximação é:

* *TCompGrid* : É um conjunto de elementos e nós computacionais, materiais e condições de contorno. O usuário tem acesso direto às listas da classe. Ao contrário da malha geométrica, a malha computacional particiona o domínio. Além dos métodos de acesso e auxílio, a malha proporciona métodos para :
  - Calcular o número de equações do modelo
  - Calcular a largura de banda do sistema
  - Renumeração dos nós seguindo o algoritmo de Cuthill-McKee
  - Calcular o tamanho dos blocos do sistema de equações (ver definição das classes matriz)
  - Montar o sistema de equações globais e o vetor de carga
  - Carregar um vetor de solução nos graus de liberdade

* *TCompEl* : a classe *TCompEl* define o comportamento que um elemento computacional precisa implementar para enquadrar-se no ambiente PZ. A maioria da implementação desses métodos é feita nas classes derivadas. Caso a classe derivada não implemente algum desses, o método implementado pela classe *TCompEl* resultará em mensagem de aviso e/ou saída do programa. Em terminologia de programação orientada para objetos, a classe *TCompEl* é definida como abstrata. O comportamento da classe *TCompEl* é amplo e inclui os seguintes métodos:
  - Definição da ordem de interpolação nas várias direções. Isto define o comportamento da adaptatividade tipo p
  - Definição da regra de integração para o elemento. Como padrão, o elemento utiliza a regra suficiente para a integração do quadrado das funções de forma que incorpora. Este método permite a incorporação da sub-integração
  - Cálculo da função de forma em um dado ponto paramétrico. Este método é auxiliar para o cálculo da matriz de rigidez
  - Cálculo da matriz de rigidez do elemento
  - Aplicação da condição de contorno sobre a matriz de rigidez
  - Projeção do fluxo associado a lei de conservação sobre o espaço de interpolação
  - Cálculo do erro de aproximação baseado na função interpolada do fluxo (implementação do estimador de Zienkiewicz e Zu)
  - Montar a estrutura de dados para eliminar os graus de liberdade dos nós internos do elemento. Este método é implementado apenas na classe *TSuperEl*

Da classe *TCompEl* são derivadas as classes *TCompEl1d*, *TCompEl2d*, *TCompElQ2d*, *TCompElT2d*, que implementam o comportamento para aproximações uni-dimensionais, bi-dimensionais, bi-dimensionais quadrilaterais e bi-dimensionais triangulares respectivamente.

* *TDofNod* : Define um conjunto de graus de liberdade da malha computacional. Os objetos incluem o número da equação associada aos graus de liberdade, os valores da solução atual e o número de elementos conectados aos mesmos.

<u>Definição dos coeficientes da equação diferencial e as condições de contorno</u>. No conceito do programa, a matriz de rigidez é vista como o integral de uma função cujos argumentos são os valores das funções de forma e suas derivadas e cujo resultado é um valor matricial. A classe que implementa esta função é a classe *TMaterial*. Este nome foi escolhido porque é

nesta classe que são armazenados os coeficientes do material correspondentes a um problema de mecânica computacional.

* *TMaterial* : A principal função desta classe é calcular a contribuição para a matriz de rigidez dos nós internos e das condições de contorno. Tendo em vista o fato que as respostas de materiais uni-dimensionais é diferente da resposta de materiais bi-dimensionais (um utiliza uma derivada, o outro utiliza duas derivadas), foram incluídos métodos para verificar se o objeto pertence a uma classe derivada de classe raiz apropriada.

* *TBndCond* : Implementa a definição da condição de contorno. Os objetos do tipo *TBndCond* não implementam a condição de contorno. Apenas armazenam os dados utilizados pelos objetos do tipo *TMaterial* para aplicação das condições de contorno. Para garantir a compatibilidade com o objeto do tipo *TMaterial* o construtor dos objetos é acessível apenas aos objetos tipo *TMaterial*.

CLASSE TMATRIX ORIENTADA A OBJETOS

Existem atualmente muitas bibliotecas que manipulam matrizes com muita eficiência tais como LAPACK, LINPACK, EISPACK. Porém, estas bibliotecas foram concebidas com uma filosofia estrutural, o que as torna difícil de manipular e estender. Suas novas versões "Orientadas a Objeto" como por exemplo LAPACK++ são adaptações das versões estruturadas e não incorporam as vantagens oferecidas por um projeto orientado a objetos. Outro inconveniente destas bibliotecas é usar demasiados argumentos na chamada de suas funções, tornando seu uso tedioso.

Nosso objetivo é criar uma biblioteca de alto desempenho, orientada para objetos que:

* Manipule matrizes com diferentes padrões de armazenamento
* Seja fácil de usar e portátil para diferentes plataformas
* Que use os conceitos de encapsulação, herança, abstração de dados
* Que seja sobre tudo de fácil manutenção

Os cálculos de elementos finitos geram sistemas lineares de equações [K][u]=[F], onde a matriz de rigidez (K) pode ser simetrica ou não, dependendo da equação diferencial modelada. Também segundo a estrutura da malha, K pode ser melhor armazenada em estrutura de Banda ou Skyline, isto mostra a necessidade de ter uma biblioteca que manipule digerentes tipos de matrizes. A biblioteca chamada de ***TMatrix*** contem as seguintes matrizes:

1. Matrizes não simétricas:
   - Matriz Cheia.
   - Matriz Banda
   - Matriz Esparsa
2. Matrizes simétricas:
   - Matriz Cheia
   - Matriz Banda
   - Matriz Skyline
   - Matriz Esparsa
3. Condensação estática:
   - Matriz reduzida.

Estrutura das classes.

* Classe *TMatrix* (classe base; arquivo header tmatrix.h): Esta é a classe base da qual os diferentes tipos de matrizes foram derivadas. Nesta classe definimos o comportamento que será implementado pelas classes derivadas. Na classe *TMatrix* também foram definidos vários tipos de "flags" que contém informaçoes sobre o "estado" da matriz, como por exemplo se a matriz foi decomposta e qual decomposição foi utilizada. A obtenção deste dado justifica-se porque a matriz resultante de uma decomposição (Cholesky, LU, LDLt, etc.) é guardada na própria matriz.

Também foi assumido que qualquer operação algébrica entre matrizes vai retornar uma matriz cheia. Esta limitação cobre 99% dos casos e evita a implementação de um grande número de métodos virtualmente inúteis (e.g. multiplicação matriz skyline com matriz esparsa, banda com skyline, etc.).

Várias operações com sub-matrizes estão disponíveis, tais como: colocar uma sub-matriz dentro de uma matriz, copiar uma sub-matriz para uma matriz e somar uma sub-matriz com uma matriz. As mesmas operações com sub-matrizes também poderiam ser feitas com objetos do tipo *TBlock*, porém foram implementas para matrices para que o programador não precise definir um objeto do tipo *TBlock* se for realizar uma operação simples com uma sub-matriz.

A classe *TMatrix* não aloca memória para armazenar os elementos : ela é uma classe virtual. Mesmo assim, utilizando os métodos GetVal e PutVal (ou o operador () sobrecarregado), vários métodos de decomposição foram implementadas. Isto implica que qualquer classe derivada da classe *TMatrix* dispõe de um conjunto de algoritmos de decomposição. Porém, para melhorar a eficiência da implementação, a maioria dos métodos de decomposição são redefinidos nas classes derivadas.

Na Figura 1 podemos observar a estrutura desta classe.

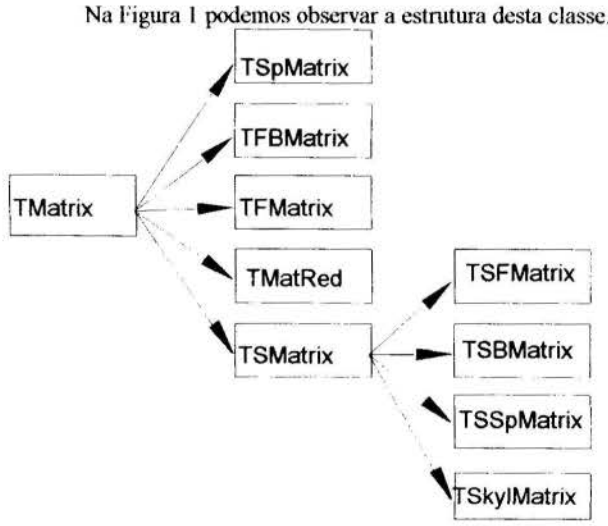


Figura 1 Estrutura das classes derivadas de TMatrix

* TFMatrix: Implementa o esquema de armazenamento de matrizes cheias. Os elementos desta matriz são alocados dinamicamente e armazenados por vetor. Este tipo de armazenamento inclui matrizes quadradas e retangulares.

* TFBMatrix: Armazena os elementos da matriz sob forma de banda não simétrica. Por exemplo, uma matriz quadrada com banda de tamanho 2 é declarada como TFBMatrix a(6,2).

* TSpMatrix: Esta classe utiliza esquema de armazenamento do tipo esparsa não simétrica. Para a alocação dos elementos deste tipo de matriz foi criada a classe *Tlink*, que implementa uma lista ligada com número indefinido de elementos. Na classe *Tlink* são feitas operações de inserir, adicionar, remover e retornar elementos da lista. O tempo de busca de um elemento da matriz é otimizado pela utilização da função "GetLast" que retorna o último elemento pedido. Este artifício aumenta o desempenho, principalmente na decomposição de matrizes.

* TMatRed: esta classe é usada para condensação estática. Maiores informações encontram-se na seção sobre condensação estática.
* TSMatrix: Esta classe é derivada da classe base *TMatrix*. Esta classe serve de base para as matrizes simétricas : *TSFMatrix* (Symetric Full Matrix), *TSBMatrix* (Symetric Banded Matrix), *TSSpMatrix* (Symetric Sparse Matrix) e *TSSkylMatrix* (Symetric Sky-Line Matrix). Assim como nas matrizes não simétricas, a classe abstrata *TSMatrix* implementa métodos genéricas de decomposição que podem ser redefinidos nas classes derivadas para melhorar a eficiência.
* TSFMatrix: Esta classe implementa esquema de armazenamento para matrizes cheias e simétricas
* TSBMatrix: Esta classe implementa esquema de armazenamento para matrizes de banda simétrica.
* TSSpMatrix: Esta classe implementa matrizes esparsas simétricas. A filosofia utilizada para a alocação deste tipo de matriz é igual à da classe *TSpMatrix* (Matrizes esparsas não simétricas), porém nesta classe as listas ligadas partem dos elementos da diagonal da matriz.
* TSkylMatrix: Esta classe implementa esquema de armazenamento para matrices do tipo skyline ou banda variável.

Tratatmento de blocos. A classe *TBlock* implementa uma divisão lógica da matriz em blocos de tamanho variável. O construtor tem três argumentos: um ponteiro para um objeto tipo *TMatrix*, outro inteiro que é o número de blocos que a matriz vai ter na diagonal, e um que é a dimensão de cada bloco na diagonal. A classe *TBlock* não modifica a matriz. Ela acrescenta a capacidade de endereçar os elementos da matriz por blocos.

O objeto *TBlock* contem duas informações básicas: A posição do bloco na diagonal e sua dimensão. A Figura 2 é um exemplo de uma matriz dividida em três blocos de diferentes dimensões: o bloco numero "0" de 2×2, o bloco número "1" de 3×3 e o bloco número "2" de 2×2. As básicas informações mostradas na Figura 3 são suficientes para calcular também a posição de qualquer bloco fora da diagonal.

Figura 2 Matriz divida em três blocos

Posição na Diagonal	0	1	2
Dimensão	2	3	2

Figura 3 Informações contidas no objeto TBlock

Outra funcionalidade da classe *TBlock* inclui a extração de um dado bloco da matriz.

CONDENSAÇÃO ESTATICA

A classe *TMatRed* implementa sistemas de equações lineares quadrados com vetor de carga e oferece ao usuário a opção de dividir as equações em dois conjuntos : um conjunto de equações internas e um conjunto de equações externas. O objeto do tipo *TMatRed* tem dois estados principais : o estado de matriz comum e o estado de matriz condensada. No estado de matriz comum os objetos tipo *TMatRed* comportam-se como objetos do tipo *TMatrix*. A transição do estado de matriz comum ao estado de matriz condensada reduz a matriz correspondente ao conjunto de equações internas sobre a matriz do conjunto de equações externas.

Os objetos do tipo *TMatred* contêm 1 ponteiro para um objeto *TMatrix* e 5 ponteiros para objetos tipo *TFMatrix* onde são armazenados as submatrizes KIJ e FI (ver Tabela 1). Observa-se que o ponteiro para o objeto K00 pode ser inicializado com o endereço do objeto de qualquer tipo derivado do *TMatrix*.

*TMatrix K00	*TFMatrix K01	*TFMatrix F0
*TFMatrix K10	*TFMatrix K11	*TFMatrix F1

Tabela 1 Ponteiros contidos no tipo TMatRed

Este novo sistema de equações definido por sub-matrizes, pode ser resolvido com operações de submatrizes, como exemplo:

$$\begin{bmatrix} [K(0,0)] & [K(0,1)] \\ [K(1,0)] & [K(1,1)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [U0] \\ [U1] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [F0] \\ [F1] \end{bmatrix}$$

A condensação dos graus de liberdade U0 sobre os graus de liberdade U1 segue as seguintes relações:

$$[K11]_{RED} = [K(1,1)] - [K(1,0)][K(0,0)]^{-1}[K(0,1)]$$

$$[F1]_{RED} \quad [F1] \quad [K(1,0)][K(1,1)]^{-1}[F0]$$

Após o cálculo dos valores U1, os valores U0 são calculados com base em :

$$[U0] \quad [K(1,1)]^{-1}([F0] \quad K(0,1)U1)$$

O sistema que contribui para o sistema global de equações é $[K(1,1)]_{RED}$ e $[F(1)]_{RED}$.

A CLASSE SUPER ELEMENTO (*TSuperEl*)

A classe *TSuperEl* é derivada das classes *TCompEl* e *TCompGrid*, isto porque, por definição, um subdomínio é uma parte do domínio que contem uma malha interna. Para a malha que contem o super-elemento, os objetos *TSuperEl* têm comportamento de elemento. Neste quadro é possível criar super-elementos dentro de outros super-elementos. A Figura 4 mostra um exemplo onde a malha é dividida em quatro super-elementos e onde o objeto do tipo *TSuperEl* S1 contém outros quatro super elementos (Ss0, Ss1, Ss2, Ss3)

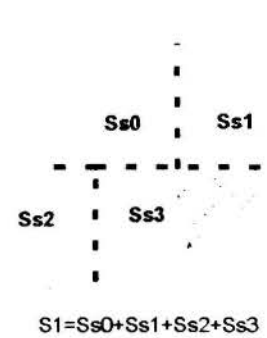


Figura 4 Malha com Super Elementos

Uma característica importante do super-elemento é que no comportamento como elemento ele acusa apenas os nós de fronteira (nós externos). Assim a malha ao qual o super-elemento pertence não enxerga os nós internos do mesmo.

Internamente, o objeto do tipo *TSuperEl* tem como variável membro um ponteiro para um objeto do tipo *TMatRed*, que implementa todas as operações algébricas necessárias para a condensação estática do sistema de equações.

Os objetos de *TSuperEl* tem dois estados. O estado inicial é o estado não condensado, em que a malha à qual o objeto pertence enxerga o super-elemento como um elemento com grande número de nós e equações. O outro estado é o estado condensado onde o super elemento torna apenas os nós com conectividade externa visível. Neste estado a malha ao qual o super-elemento pertence enxergua apenas os nós de interface do sub-domínio. A transição de um estado para outro é feito pelo método *ReduceInternalNodes()*, método da classe *TCompEl*, mas apenas implementado na classe *TSuperEl*.

Funções Membro.O comportamento de TSuperEl precisou ser adequado, para um comportamento de malha e elemento ao mesmo tempo. Os métodos e características do TCompGrid foram herdados sem modificação, já o comportamento de elemento proveniente de TCompEl precisou ser implementada.

* NumNodes(): Dependendo do estado do objeto, este método retorna o número total de nós contidos na sub-malha ou o número de nós externos do sub-domínio.
* Node(i): Retorna um ponteiro do tipo *TDofNod*, do no *i* do super elemento
* Print: Este método imprime as características do objeto *TSuperEl*.
* CalcStiff: Esta função calcula a matriz de rigidez de um objeto *TSuperEl*. Esta operação envolve a montagem do sistema de equações da sub-malha (O super elemento comporta se como malha), a condensação estática dos nós internos (Dependendo do estado do objeto), e devolve como resultado a matriz condensada $[K(1,1)]_{RED}$ e $[F(1)]_{RED}$. Na montagem do sistema de equações, vários métodos herdados do *TCompGrid* são utilizados, por exemplo, NumEquations(), BandWidth(), Assemble().
* ReduceInternalNodes: Neste método avalia-se quais nós são internos ao sub-domínio e quais nós têm conexões externas. Os nós internos são *removidos* da malha à qual o super-elemento pertence e armazenados na estrutura interna do elemento.
* ComputeNodElCon: Este método redefine o método correspondente da classe *TCompGrid*, incrementando uma conectividade a mais aos nós externos da sub-malha. Deste truque resulta que os nós externos da sub-malha são enumerados por último no algoritmo de Cuthill-McKee herdado da classe *TCompGrid*.

CONCLUSÕES

A técnica de sub-estruturação é implementado de forma consistente no âmbito da filosofia de programação orientada para objetos. Duas classes formam a base desta implementação. A classe *TMatRed* permite particionar as equações que representa em dois grupos : as equações dependentes e as equações externas. Esta classe implementa as operações algébricas da condensação estática de sistemas de equações. A classe *TSuperEl* implementa a interface com o programa de elementos finitos : ela determina quais são os graus de liberdade internos e externos e apresenta uma interface consistente com a malha a qual pertence.

Trabalhos futuros. Pretende-se avaliar o desempenho numérico da implementação da técnica de sub-estruturação e explorar as diversas aplicações da técnica. Percebe-se que a técnica de sub-estruturação tem semelhança com a resolução multi-frontal. A principal motivação para o desenvolvimento deste trabalho é o desenvolvimento de algoritmos paralelos para elementos finitos.

AGRADECIMENTO

Os autores agradecem à FAPESP pelo auxílio para o desenvolvimento deste trabalho sob ós processos No 94/4159-1 e 93/0241-2 e ao CNPq para apoio sob o processo No 522135/94-3

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

Devloo, P. R. B., Alves, J. S. R. (1992) "On the development of a finite element program based on the object oriented programming philosofy," First European Conference on Numerical Methods in Engineering, Brussels, pp39-42

Devloo, P. R. B. "Efficiency issues in an object oriented programming environment," (1994) Second International Conference on Computational Structures Technology, Athens, Greece, pp 147-152.

Ellis, M. A., Stroustrup, B. C. (1993) **Manual de referência comentada**. Editora CAMPUS, Rio de Janeiro.

Golub, G. H., Van Loan, C. F. (1983) **Matrix Camputations**. The John Hopkins University Press.

Jun Lu, White, D. W., Chen, W. F., Dunsmore, H. E. (1995) "A matrix class library in C++ for structural engineering computing" Computers & Structures, Vol 55, No 1 pp 95-111.

Khoshafian, S., Abnous, R. (1991) **Object Oriented-Concepts Languages, Data base, User Interfaces**. John Wiley & Sons.

Keyes, D. E., Saad, Y., Truhlar, D. G. (1995) **Domain-based parallelism and problem decomposition methods in computational science and engineering**, SIAM.

Zeglinski, G. W., Han, R. P. S. (1994) "Object oriented matrix classes for use in a finite element code using C++" IJNME, Vol 37, pp 3921-3937.

ABSTRACT

This paper describes the implementation of technique of sub-structuring implemented within the object oriented programming philosophy. First, the object oriented environment for the development of finite element algorithms (PZ) is described. Then the set of classes which implement different matrix structures are described. Finally the classes which implement the sub-structuring technique are described. The result of this effort is an environment which allows for the use of the sub-structuring technique applied to virtually any finite element simulation.

REFINAMIENTO DE MALLA ADAPTABLE EN EL METODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS

Juan F. Briceño
Departamento de Ingenieria Mecánica
Universidad Nacional Experimental Politécnica
Apdo. 539 Barquisimeto Estado Lara Venezuela

RESUMEN

En este trabajo se presenta un esquema de refinamiento de malla adaptable para el problema de Transferencia de Calor en una placa plana, cuando la temperatura de sus lados son conocidas (problema de Poisson en una región bidimensional). Se parte de la modelación matemática del problema por medio de un funcional y el refinamiento adaptable se implanta en base a la variación del funcional en la dirección del gradiente.

INTRODUCCION

En este trabajo se analizará un criterio para evaluar la solución aproximada y proceder al refinamiento. Este criterio surge cuando el problema es modelado por la minimización de un funcional, la malla se modifica en función de la magnitud de las variaciones del funcional a refinar en cada elemento de la malla Gonzalez(1993), Gonzalez(1991). El MEFA se aplicará sobre el problema particular de POISSON.

Existen varias publicaciones a nivel internacional Babuska y Miller (1984), Babuska y Rheinboldt (1978), Kelly y otros (1983), Babuska y otros (1986), Zienkiewcz y Zhu (1987), Gonzalez y otros (1994) que enfocan el MEFA en función de estimaciones de error y en base a ellas establecer un criterio de refinamiento. Esto constituye una fuente de investigación abierta.

Este trabajo pretende dar un esquema alternativo que no necesita disponer de la estimación del error y de allí su importancia en esta área.

REFINAMIENTO EN LA DIRECCION DEL GRADIENTE

Este tipo de refinamiento es aplicable cuando el modelo matemático del problema esta representado por la minimización de un funcional.

Se considera un espacio H de funciones v definidas en el dominio del problema y que satisfagan las condiciones de contorno prescritas. Sea J un funcional real definido en H, que generalmente es la energía de un cierto sistema físico.

Un problema clásico de minimización en el cálculo de variaciones, es encontrar una función u del espacio funcional H en la cual el funcional J asume su menor valor. En otras palabras "u es la minimización de J sobre H"; es decir que:

$$J(u) \leq J(v) \qquad \forall v \in H \tag{1}$$

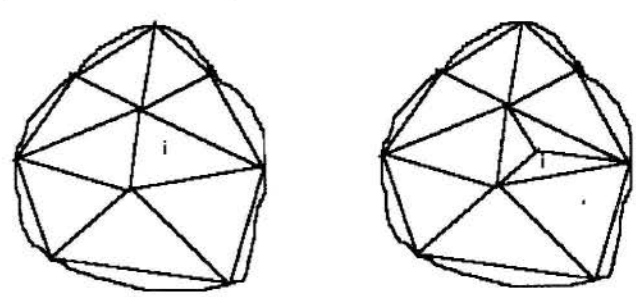
La expresión (1) es denominada formulación variacional y constituye un camino natural para encontrar una solución aproximada. Podría plantearse como solución aproximada la función u_h que minimiza al funcional $J(v)$ en el sub-espacio de aproximación H_h de H.

El espacio H_h puede construirse por el Método de los Elementos Finitos y en este caso se le asocia una malla τ_h. Al variar la malla τ_h, se obtiene un nuevo espacio H_h y una nueva solución aproximada u_h que corresponde al punto estacionario de $J(v)$ en el nuevo espacio H_h. En consecuencia, surge así el concepto de variación de un funcional al variar el espacio de aproximación H_h.

Definición 1 Sea $J(u)$ un funcional definido en el espacio H sea H_{hu} un espacio de elementos finitos obtenidos a través de una malla τ_{hu}, figura 1a. Siendo H_{hu} un sub-espacio de H. Sea H_{hv} el espacio de elementos finitos obtenidos al refinar la malla en el elemento i de la malla τ_{hu}, figura 1b. Sea u_h la solución de elementos finitos en la malla τ_{hu} y sea v_h la solución de elementos finitos en la malla τ_{hv}. La variación de $J(u)$ evaluada en u_h en la dirección $(v_n - u_h)$ es definida por:

$$J'(u_h)(v_h - u_h) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{J[u_h + \alpha\,(v_h - u_h)] - J(u_h)}{\alpha} \tag{2}$$

En el cálculo de variaciones clásico tanto el punto (función) donde se evalúa la variación como la dirección en que se evalúa, pertenecen al mismo espacio.



a) Malla τ_{hu}, define H_{hu} b) Malla τ_{hv}, define H_{hv}

FIGURA 1 - Refinamiento de malla, en el elemento i.

La variación del funcional como es indicada por la Ec. (2) involucra funciones u_h, v_h pertenecientes a espacios diferentes H_{hu}, H_{hv}. Por lo tanto en la definición de variación de un funcional al variar el espacio de aproximación, la magnitud de la variación $J'(u_h)(v_h - u_h)$ es indicativa de la calidad de la aproximación u_h y dará información sobre la conveniencia de refinar o no en esa dirección, en este concepto se basa el refinamiento adaptable.

Para implantar el refinamiento adaptable, fue necesario diseñar un generador de mallas con características adecuadas al esquema planteado. El esquema de refinamiento sigue los siguientes pasos:

Dada una tolerancia η en el sentido de $|J'(u)| / |J(u)|$ y dada una región Ω, de definición del problema, definir una malla elemental con N_n nodos, N_e elementos.

P1-Resolver el problema de elementos finitos en la malla, obteniendo la solución u_h, luego evaluar el funcional $J(u_h)$ que se denominará $J(u_h)_{viejo}$.

P2-Utilizando esta malla, para cada elemento i:

P2-1 Refinar en cada elemento, con lo cual se obtiene, en cada caso, un nuevo espacio de aproximación $H_{hi}(i = 1, 2, \ldots, N_e)$ y calcular la solución de elementos finitos v_{hi} en cada espacio H_{hi}

P2-2 Aplicar la Ec. (2) para obtener la variación del funcional:

$$J'(u_h)_i = \frac{J'(u_h)(v_{hi} - u_h)}{\|v_{hi} - u_h\|} \qquad (3)$$

esta sería la variación del funcional evaluado en u_h al refinar en el elemento i.

P2-3 Calcular la variación permisible:

$$J'(u_h)_{permisible} = \eta \frac{|J(u_h)|}{N_e} \qquad (4)$$

$\eta|J(u_h)|$ representa la variación global del funcional, de allí que para reflejarla a nivel de cada elemento sea necesario dividir entre N_e.

P2-4 En cada elemento calcular:

$$\xi_i = \frac{|J'(u_h)_i|}{J'(u_h)_{permisible}} \qquad (5)$$

P2-5 Refinar o desrefinar en cada elemento según :

$$h_{i-nuevo} = \frac{h_{i-viejo}}{\xi_i^{1/\beta}} \qquad (6)$$

donde β es el orden de convergencia de la solución aproximada que depende del grado de los polinomios utilizados en las funciones bases y la regularidad de la solución exacta.

Finalizado este paso P2 se tiene definido para cada elemento i un tamaño de malla $h_{i-nuevo}$; que será la base para el esquema de refinamiento.

P3- Calcular u_h en la nueva malla y evaluar $J(u_h)$ que se denomina J_{nuevo}, si:

$$\left| \frac{J_{nuevo} - J_{viejo}}{J_{nuevo}} \right| \leq \eta \qquad (7)$$

parar, en caso contrario repetir el proceso con esta malla.

RESULTADOS NUMERICOS

EJEMPLO UNO

Sea Ω la región mostrada en la figura 2 y sea el siguiente problema de Poisson, con las condiciones de contorno indicadas en la figura. La malla inicial es dada en la figura 3.

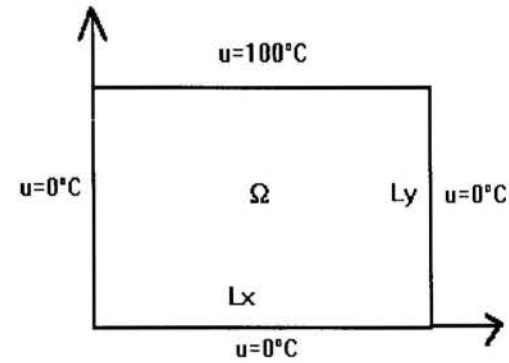


Figura 2 - Región bidimensional.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k_x \frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_y \frac{\partial u}{\partial y}\right) + Q = 0 \qquad (8)$$

$u = 0$ en x=0 (9)

$u = 0$ en x=L_x (10)

$u = 0$ en y=0 (11)

$u = 100$ en y=L_y (12)

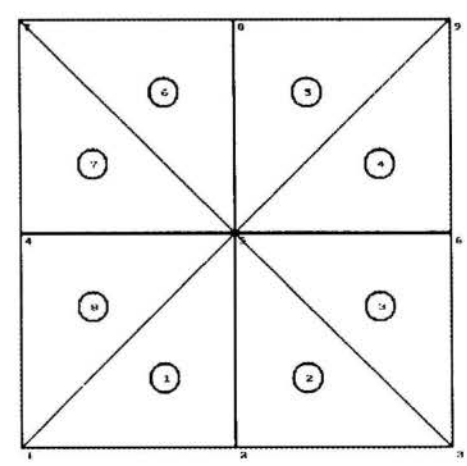


Figura 3 - Malla inicial.

Este es un problema con una singularidad fuerte originada porel salto de la variable en el contorno.

El funcional correspondiente a la ecuación general Ec. (8) es dada por:

$$J(u)=\int_{\Omega}\frac{1}{2}\left[k_x\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+k_y\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2-2Qu\right]d\Omega \qquad (13)$$

La variación de este funcional se determina en base a lo antes expuesto, resultando:

$$J'(u_h)(v_h-u_h)=$$
$$\int_{\Omega}\left(k_x u_{hx}(v_{hx}-u_{hx})+k_y u_{hy}(v_{hy}-u_{hy})-Q(v_h-u_h)\right)d\Omega \qquad (14)$$

La solución u consiste en minimizar el funcional dado en la Ec. (13) y definido en la región Ω. Las variaciones del funcional son obtenidas de la Ec. (14). En el caso particular de $L_x/L_y=1$, $k_x=k_y$, $Q=0$, las figuras 4, 5, 6 y 7 indican la secuencia de mallas obtenidas por el refinamiento adaptable en función de la variación del funcional. Este es un problema con una singularidad fuerte originada por el salto de la variable u en el contorno. En las figuras se puede observar que el método tiende a generar una malla que se refina siguiendo la singularidad.

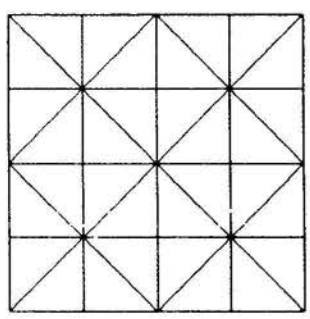


Figura 4 - Malla uno.

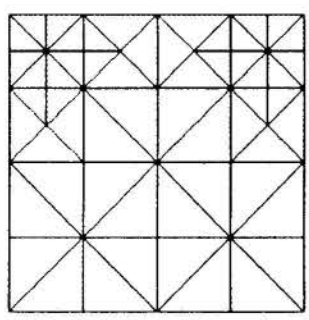


Figura 5 - Malla dos

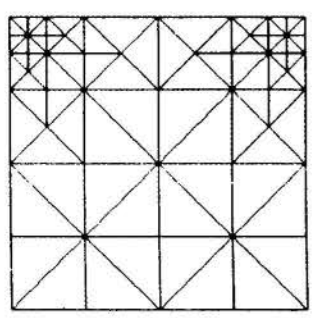


Figura 6 - Malla tres.

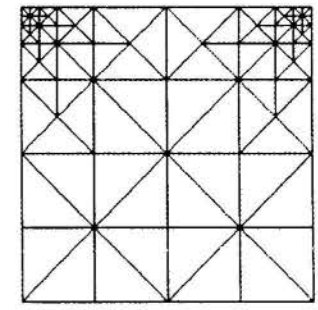


Figura 7 - Malla cuatro.

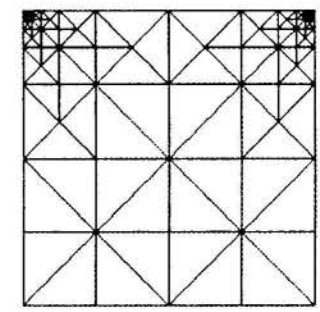


Figura 8 - Malla cinco.

EJEMPLO DOS

Sea el mismo problema anterior pero sometido a las condiciones de contorno mostrada en la figura 9. La solución exacta u en este caso toma la forma :

$$u=\frac{\operatorname{senh}(\pi y/L_y)\operatorname{senh}(\pi x/L_x)}{\operatorname{senh}(\pi L_y/L_x)} \qquad (15)$$

El valor exacto del funcional correspondiente es dado por:

$$J(u_h)=\frac{\pi}{4}\frac{\cosh\pi}{\operatorname{senh}\pi}=0.78832716 \qquad (16)$$

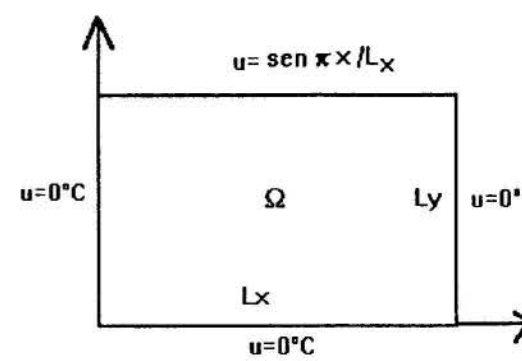


Figura 9 - Región bidimensional.

La solución por el refinamiento adaptable es presentado en las figuras 10, 11, 12, 13 y 14 y es dada en la tabla 1.

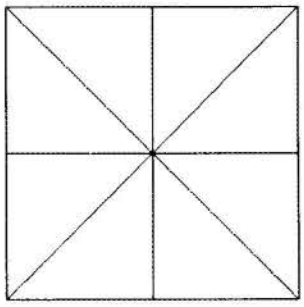


Figura 10 - Malla uno.

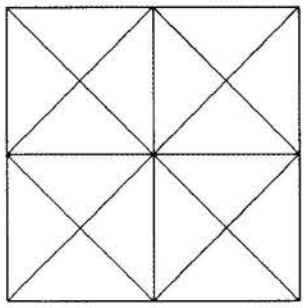


Figura 11- Malla dos

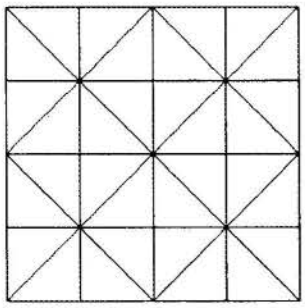


Figura 12 - Malla tres.

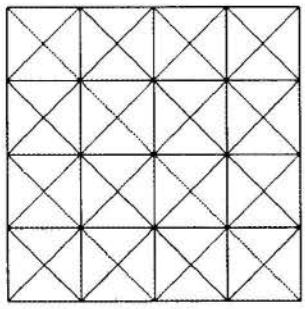


Figura 13 - Malla cuatro.

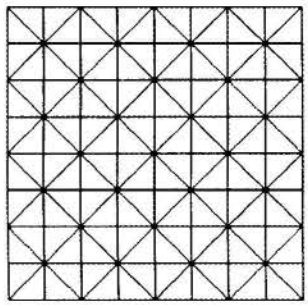


Figura 14 - Malla cinco.

TABLA 1

MALLA	NODOS	ELEMENTOS	J(Uh)	J(Uh)teórico
1	8	9	0.8750000	0.788327
2	16	13	0.7187500	0.788327
3	32	25	0.8236400	0.788327
4	64	41	0.7812020	0.788327
5	128	81	0.7982294	0.788327

CONCLUSIONES

Analizando las figuras 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13 y 14, se puede afirmar que utilizando el criterio de la variación del funcional en la direction del gradiente para refinamiento adaptable, se obtienen resultados satisfactorios, se observa que el refinamiento se orienta hacia el sitio donde están las singularidades, esto era predecible puesto que en estos sitios la solución tiene singularidades y la variación del funcional será mayor.

Este método tiene la ventaja que no necesita conocer estimaciones de error, indispensables en los métodos desarrollados hasta ahora. Se pretende dar un esquema alternativo confiable. Los resultados obtenidos son satisfactorios y haciendo los ajustes pertinentes se puede aprovechar su potencial utilización en la localización de fallas geológicas al interpretar registros sísmicos, de gran importancia en la acumulación de petróleo.

Este refinamiento en la dirección del gradiente permite refinar mas donde la función solución del problema o sus derivadas tengan fuertes variaciones. Esto debido a que en la definición de la variación del funcional $J'(u_h)(v_h - \dot{u}_h)$ dada en la Ec. (14), al existir mayor diferencia entre las funciones u_h, v_h mayor será el valor de éste.

El ejemplo dos, permite verificar que el esquema planteado para obtener la solución numérica por el método de los

elementos finitos es adecuado según se desprende de la tabla 1, siendo el error $\frac{J(u)-J(u_h)}{J(u)}$ menor del 15%.

REFERENCIAS

Babuska, I. y Miller, A. 1984, "The post-processing approach in the finite element method" - part 1: calculation of displacement, stresses and other higher derivatives of the displacements, Int. J. Num. Meth. Eng., 20, pp 1085-1109.

Babuska, I. y Miller, A. 1984, "The post-processing approach in the finite element method" - part 2: The calculation of stresses intensity factor, Int. J. Num. Meth Eng., 20, pp 1111-1129.

Babuska, I. y Miller, A. 1984 "The post-processing approach in the finite element method" - part 3: A posteriori error estimates and adaptive mesh selection, Int. J. Num. Meth.Eng., 20, pp 2311-2324.

Babuska, I. y Rheinboldt, W.C. 1978, "A posteriori error. Meth. Eng", pp 12,1597-1615.

Babuska, I. y otros., 1986, "Accuracy Estimates and Adaptive Refinement in Finite Element Computations", Willey, New York.

Gonzalez, C., 1993, "El método de los elementos finitos adaptable", Tesis de Doctorado, U.C.V, pp. 19-23.

Gonzalez, C., 1991, "Generación de malla adaptable en el método de los elementos finitos", Trabajo de ascenso a Titular, U.C.L.A, pp 11-15.

Gonzalez, C . y otros, 1994, "El metodo de los elementos finitos adaptables": Estimaciones de error, Revista Internacional de Métodos Numéricos y Diseño en Ingeniería. España .

Kelly, D.W. y otros 1983, "A posteriori error analysis and adaptive procedure in the finite element methods". Part 1, Int. J. Num. Meth. Eng., 19 pp 1593-1619.

Kelly, D.W. y otros, 1983, "Adaptive mesh refinement". Part 2, Int. J. Num. Meth. Eng., 19, pp 1621-1656.

Zienkiewcz O.C. y Zhu J.Z., 1987, "A simple error estimator and adaptive procedure for practical engineering analysis", Int. J. Num. Meth. Eng, 24, pp 337-357.

ABSTRACT

In this work a scheme of refinement of adaptive mesh for the problem of Transfer of Heat in a plane badge is introduced, when the temperature of their sides is known (problem of Poisson in a region bidimensional. It leave of the mathematical behaviour of the problem by means of a functional and the adaptive refinement is implanted in base to the variation of the functional in the address of the gradient.

ABCM

SOLUTION OF INCOMPRESSIBLE AND COMPRESSIBLE FLUID FLOWS BASED ON RUNGE-KUTTA TIME-STEPPING SCHEMES

De Bortoli, A. L.
Department of Mechanical Engineering - PROMEC
Federal University of Rio Grande do Sul
Sarmento Leite, 425 - 90050-170 - Porto Alegre - Brazil

SUMMARY

The great development of numerical calculation leads to a variety of numerical methods, which are different in their solution algorithms as well as in their discretization of the governing equations. Despite this development, much work still remains to improve them towards a fast, accurate and stable convergence. This work employs a numerical method to solve compressible and incompressible fluid flows using a finite-volume, explicit Runge-Kutta multistage scheme, with central spatial discretization in combination with multigrid and preconditioning. Numerical tests are carried out for the NACA 0012 airfoil and a three dimensional channel for the Euler equations. Mach number is varied between 0.8 and 0.002.

INTRODUCTION

The rapid evolution of computational fluid dynamics has been driven by the need of faster and most accurate methods for the calculation of flow fields around configurations of technical interest. Numerical simulation plays nowadays an important role to predict the flow field in many situations. To design a new mechanical device involving fluid dynamics, a numerical simulation is well accepted and justified. It is already possible to solve the flow over a complete and complex geometry for special flow regimes.

Numerical methods allow us to analyse some important phenomena, where experiments are usually too expensive or even impossible. In this way, the interest is the development of efficient methodologies that can be employed to solve compressible and incompressible fluid flows. As the used methodologies are limited in what concerns to accuracy, cost and applicability, they must be investigated in order to design at low costs.

Extensions of the numerical methodologies employed to solve compressible (Choi and Merkle, 1993) (De Bortoli, 1994) and incompressible (Van Doormaal, 1985) (Maliska and Silva, 1989) fluid flows have been applied, with success, for the solution of all speed flows. However, there are no general methods for all situations.

The potential set of equations (simplified equations) were and sometimes are still used to solve compressible and incompressible fluid flows. This is done in order to simplify the analysis and to reduce the computational costs. However, the only adequate model for non viscous flows are the Euler equations, in which mass, momentum and energy are conserved.

Techniques to accelerate the convergence are important tools to analyse problems which require fine grids. Some of these approaches, namely the local time-stepping, residual averaging and multigrid techniques are widely applied (Brandt, 1981), (Jameson, 1985), (Radespiel, 1989). The local time-stepping allows to obtain steady-state solutions with less computational effort. Residual smoothing is employed to increase the CFL number of an explicit multistage scheme and consists in replacing the residuals by an average of neighbouring residuals. The idea of the multigrid approach is the use of a sequence of successively coarser meshes to efficiently damp disturbances through the flow field.

Common methods employed for the solution of flow problems are the finite differences, finite volume, finite elements and boundary elements. Each of these methods has its advantages and disadvantages.

The standard compressible method is employed for the solution of compressible and incompressible fluid flows. It consists in the use of the momentum equations to calculate the velocity components, the energy equation to calculate the energy, the mass conservation equation to calculate the density and the state equation to calculate the pressure.

In order to eliminate numerical difficulties solving mixed flows, preconditioning is employed (Choi and Merkle, 1985) (Choi and Merkle, 1993). It consists in the transformation of the governing equations into a form that is numerically better conditioned, ensuring rapid convergence (De Bortoli, 1994). The preconditioning system has a rate of convergence almost independent from the Mach number. Moreover, the discrete solution is highly improved, eliminating spurious oscillations frequently encountered in incompressible flows (Storti et al, 1995).

This work shows the numerical method employed for the solution of compressible and incompressible fluid flows based on the finite volume explicit Runge-Kutta (Jameson et al, 1981) multistage scheme with central spatial discretization in combination with multigrid and preconditioning. Numerical tests are carried out for a three dimensional channel and the NACA 0012 airfoil. Mach number is varied between 0.8 and 0.005. Results obtained with the Euler equations are validated using the potential (analytical) equation solutions or experimental data found in the literature.

GOVERNING EQUATIONS

The governing equations for non viscous flows are the Euler equations. The three dimensional Euler equations for unsteady compressible inviscid flows in integral form read (Kroll and Jain, 1987):

$$\frac{\partial \vec{W}}{\partial t}+\frac{\partial \vec{F}_1}{\partial x}+\frac{\partial \vec{F}_2}{\partial y}+\frac{\partial \vec{F}_3}{\partial z}=0 \qquad (1)$$

where

$$\vec{W}=\begin{Bmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ \rho w\\ \rho E\end{Bmatrix},\quad \vec{F}=\begin{Bmatrix}\rho\vec{q}\\ \rho u\vec{q}+p.\vec{i}\\ \rho v\vec{q}+p.\vec{j}\\ \rho w\vec{q}+p.\vec{k}\\ \rho H\vec{q}\end{Bmatrix}$$

The total energy and total enthalpy are

$$E=e+\frac{u^2+v^2+w^2}{2},\quad H=E+\frac{p}{\rho}$$

and $\vec{q}=u.\vec{i}+v.\vec{j}+w.\vec{k}$ is the velocity vector.

To close this system of equations the state equation for a perfect gas is employed (Kroll and Rossow, 1989)

$$p=\rho RT=(\gamma-1)\rho[E-\frac{u^2+v^2+w^2}{2}]$$

where R is the gas constant, ρ the fluid density, u, v and w the velocity components, p the pressure and T the temperature. Eq. (1) can be cast into the integral form (Kroll and Jain, 1987)

$$\int_V \frac{\partial \vec{W}}{\partial t}dV+\int_S(\vec{F}.\vec{n})dS=0$$

It is well known that when the magnitude of velocity becomes small, in comparison with the acoustic speed, the time-marching schemes converge very slowly. Therefore preconditioning is employed. The used one consists basically in multiplying the vector $\vec{W}$ by a special matrix, which modifies the form of the governing equations (Choi and Merkle, 1985). Based on the conservative variables, the following preconditioning matrix is employed:

$$\Gamma\frac{\partial \vec{W}}{\partial t}+\frac{\partial \vec{F}_1}{\partial x}+\frac{\partial \vec{F}_2}{\partial y}+\frac{\partial \vec{F}_3}{\partial z}=0$$

where (Choi and Merkle, 1985)

$$\Gamma=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&1&0&0\\0&0&0&1&0\\ \frac{qf_2}{2}&uf_1&vf_1&wf_1&M^{-2}\end{bmatrix}$$

and

$$q=u^2+v^2+w^2$$
$$f_1=1-M^{-2}$$
$$f_2=M^{-2}-1$$

Inspection of this preconditioning matrix indicates that the energy equation is transformed into an equation for temperature for low Mach-numbers. Thus, the eigenvalues of the resultant system of equations will be very similar when the Mach-number goes to zero, laying the basis of construction of efficient solvers (Choi and Merkle, 1993) also to solve incompressible flows (De Bortoli, 1994).

DESCRIPTION OF THE NUMERICAL METHOD

One of the differences among the various finite volume formulations known in the literature is the arrangement of the control volume and update points for the flow variables (Kroll and Jain, 1987) (Kroll and Rossow, 1989). The most frequently used schemes are the cell-centered, cell-vertex and node-centered approach. Each of these schemes has its advantages and disadvantages. The discretization used in this work is based on the node-centered and cell-centered arrangements (Blazek, 1994) (Kroll and Rossow, 1989).

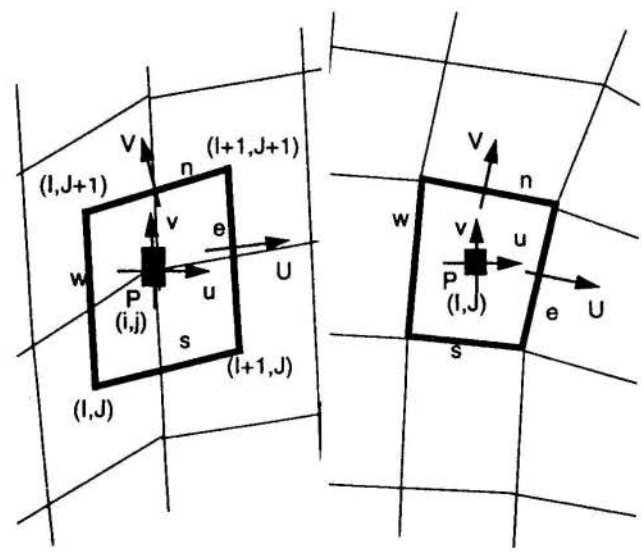


Fig. 1 Node-centered and cell-centered arrangements

As Eq. (1) is valid for arbitrary control volume, it is also valid for $V_{i,j,k}$, that means

$$\frac{\partial \vec{W}_{i,j,k}}{\partial t}=-\frac{1}{V_{i,j,k}}\int_S(\vec{F}.\vec{n})dS$$

The finite volume discretization based on the central averaging is not dissipative (Kroll and Jain, 1987). The numerical procedure does not converge to the steady state solution when the high frequency oscillations of error in the solution are not damped. The dissipation vector $\vec{D}_{i,j,k}$ is

introduced by adding dissipative fluxes (Jameson et al, 1981) as follows

$$\frac{\partial \vec{W}_{i,j,k}}{\partial t} + \frac{1}{V_{i,j,k}}[\vec{Q}_{i,j,k} - \vec{D}_{i,j,k}] = 0$$

This dissipation operator is a blend of second and fourth differences and is defined according to (Radespiel, 1989)

$$\vec{D}_{i,j,k} = d_{i+1/2,j,k} - d_{i-1/2,j,k} + d_{i,j+1/2,k} - d_{i,j-1/2,k} + d_{i,j,k+1/2} - d_{i,j,k-1/2}$$

whose dissipation coefficient is given by

$$d_{i+1/2,j,k} = \alpha_{i+1/2,j,k}\{\varepsilon^{(2)}_{i+1/2,j,k}\delta_x \vec{W}_{i,j,k} - \varepsilon^{(4)}_{i+1/2,j,k}\delta_{xxx}\vec{W}_{i-1,j,k}\}$$

The difference operators of first and third order are δ_x and δ_{xxx}, respectively, and α is the scaling factor, which is written for the i direction as (Blazek, 1994)

$$\alpha_{i+1/2,j,k} = \frac{1}{2}(\lambda^{i*}_{i,j,k} + \lambda^{i*}_{i+1,j,k})$$

where

$$\lambda^{i*}_{i,j,k} = \lambda^{i}_{i,j,k}\phi^{i}_{i,j,k}$$

$$\phi^{i}_{i,j,k} = 1 + max\left[\left(\frac{\lambda^{j}_{i,j,k}}{\lambda^{i}_{i,j,k}}\right)^{w}, \left(\frac{\lambda^{k}_{i,j,k}}{\lambda^{i}_{i,j,k}}\right)^{w}\right].$$

The coefficients adapted to the local pressure gradients $\varepsilon^{(2)}$ and $\varepsilon^{(4)}$, needed to obtain the dissipation coefficient, are written as

$$\varepsilon^{(2)}_{i+1/2,j,k} = k^{(2)} max(\upsilon_{max}),$$

$$\varepsilon^{(4)}_{i+1/2,j,k} = max(0, k^{(4)} - \varepsilon^{(2)}_{i+1/2,j,k}),$$

where

$$\upsilon_{i,j,k} = \left|\frac{p_{i+1,j,k} - 2p_{i,j,k} + p_{i-1,j,k}}{p_{i+1,j,k} + 2p_{i,j,k} + p_{i-1,j,k}}\right|,$$

$$\upsilon_{max} = (\upsilon_{i+2,j,k}, \upsilon_{i+1,j,k}, \upsilon_{i,j,k}, \upsilon_{i-1,j,k}),$$

and

$$0.5 \le k^{(2)} \le 0.6, \qquad \frac{1}{128} \le k^{(4)} \le \frac{1}{48}.$$

The spectral radius λ is defined for the i direction according to (Choi and Merkle, 1985)

$$\lambda^{i} = \frac{u(1+M^2) + \sqrt{u^2(1-M^2)^2 + \beta^2 c^2}}{2}$$

It is well known that for a central difference scheme zero artificial dissipation viscosity creates numerical difficulties. Therefore β^2 is chosen according to (De Bortoli, 1994)

$$\beta^2 = max(4M^2, \varphi),$$

where

$$0.1 \le \varphi \le 0.6$$

TIME-STEPPING AND ACCELERATION TECHNIQUES

In order to obtain numerical solutions of high accuracy, the Runge-Kutta method is chosen (Kroll and Jain, 1987). This method is characterised by its low operation count. More than two stages are employed in order to extend the stability region. The classical fourth order Runge-Kutta method requires the evaluation of many coefficients and dissipative terms, what leads to storage problems. Therefore, the following multistage scheme, which requires few computational storage, is employed (Jameson et al, 1981)

$$\vec{W}^{(0)}_{i,j,k} = \vec{W}^{n}_{i,j,k}$$

$$\vec{W}^{(r)}_{i,j,k} = \vec{W}^{(0)}_{i,j,k} - \frac{\alpha_r \Delta t}{V_{i,j,k}}\vec{R}^{(r-1)}_{i,j,k}$$

$$\vec{W}^{(n+1)}_{i,j,k} = \vec{W}^{(r)}_{i,j,k}$$

where

$$\vec{R}^{(r)}_{i,j,k} = \vec{Q}^{(r)}_{i,j,k} - \vec{D}^{(r)}_{i,j,k}, \quad r = 0,1,2,\cdots,m$$

Efficient methods to solve flow problems are well accepted and justified. Among the used approaches the local time-stepping, residual averaging and its combination with multigrid are widely used.

Local time-stepping allows to obtain steady state solutions with less computational effort. It is equivalent to preconditioning the residual by a scalar value in each cell. It can reduce the computational time needed to obtain the steady state solution by an order of magnitude. A weighted average of residuals is employed to increase the Courant-Friedrichs-Lewy number of an explicit multistage scheme. In this way the residuals are replaced by an average of neighbouring residuals (Kroll and Jain, 1987).

The slow asymptotic convergence behaviour of numerical methods is associated to the smooth error components. The good smoothing properties of the Runge-Kutta method, specially of the 5-stage scheme, are very important to be used in a multigrid solver.

The computational procedure to illustrate the FAS (Full Approximation Storage) scheme for two grids is written as follows (Brandt, 1981):

1. Improve the solution on the finest grid
2. Inject the flow variables from the fine to the coarse grid
3. Transfer the residuals from the fine to the coarse grid
4. Solve the problem on the coarse grid

5. Interpolate the solution correction from the coarse to the fine mesh
6. Update the solution on the finest grid

For low Mach-numbers difficulties appear to smooth the low frequencies of error and, consequently, to obtain good convergence. This occurs because the eigenvalues of the compressible equations are very different when the Mach-number goes to zero. To alleviate this problem more work is done in the coarse meshes, using a W-multigrid cycle with two steps at each grid.

The success of the multigrid method depends on the use of a relaxation algorithm (Brandt, 1981), which rapidly reduce the high frequency error components. The low error frequencies in fine meshes are transformed in high frequencies in coarse meshes, where they can be smoothed.

NUMERICAL RESULTS

In the following, numerical results for a three dimensional channel and the NACA 0012 airfoil are presented and compared. One way of proving the validity of the numerical Euler solutions is to compare them with potential solutions.

The boundary conditions are far field at the inflow and outflow boundaries (Whitfield, 1983). The approach of Withfield to implement the far field boundary conditions is based on the characteristic form of the one dimensional Euler equations normal to the boundary. Although there is circulation around lifting bodies, the far field boundary conditions assume zero circulation. Therefore the boundaries have to be placed sufficiently far away from the airfoil (20 chord lengths) so that the flow field remains undisturbed. Although the far field potential is strictly valid in subsonic flows, the correction of the free stream conditions is applied in transonic flows and has been proved helpful in this regime also.

On a solid body the physical condition of no-normal-flow can be imposed. Using a body-fitted coordinate system, the body coinciding with a coordinate line is approximated by straight lines in the finite volume approximation. Hence, the no-normal flow condition reduces to zero flux velocity through the faces of the cells aligned with the body.

First computations were performed for channel submitted to incompressible flow. A channel is chosen because it represents a class of incompressible internal flow problems. A grid containing 98x14x14 cells is used, as shown in Fig. 2. This channel, the wind tunnel of Department of Mechanical Engineering of Federal University of Rio Grande do Sul, is chosen in order to analyse its design. Internal honeycombs are not taken into consideration in this first approximation.

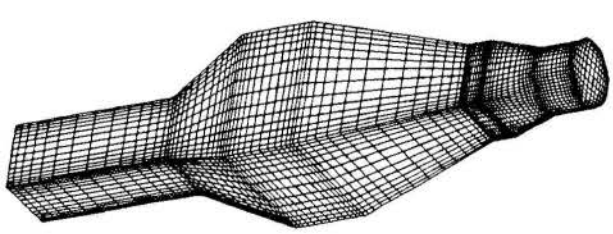


Fig. 2 Grid for channel, 98x14x14 cells (wind tunnel)

Fig. 3 shows the Mach contours computed for inflow Mach-number 0.05. The corresponding vector field is presented in Fig. 4. The analysis of these results indicates good agreement with the expected solution (potential flow). It can be seen that the velocity increases with the duct reduction and the constant Mach lines remain on it.

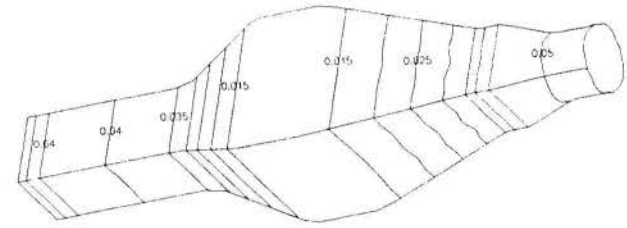


Fig. 3 Mach contours for channel, Mach = 0.05

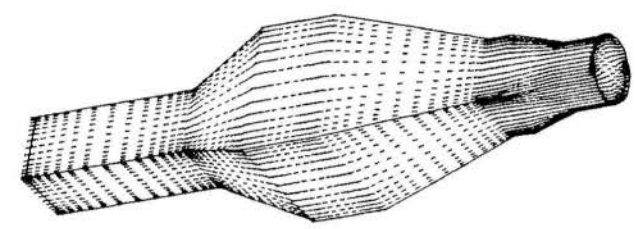


Fig. 4 Vector field for channel, Mach = 0.05

In the following, compressible and incompressible flows over the NACA 0012 airfoil are presented. Results were obtained using a C-grid topology which consists of 256x64 cells, as presented in Fig. 5. The position of the outer boundary is around twenty chord lengths away from the airfoil and the far field boundary condition is modified due to a vortex (Kroll and Jain, 1987) (Blazek, 1994). Five grids and a W-cycle were used in the multigrid process.

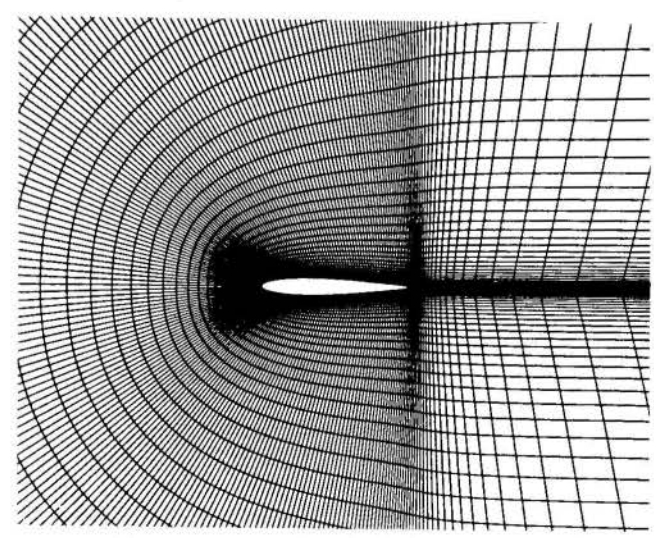


Fig. 5 Grid for NACA 0012, 256x64 cells

Fig. 6 shows the pressure contours computed for Mach = 0.8 and $\alpha = 0°$. Fig. 7 shows the pressure coefficient computed for Mach 0.005 and $\alpha = 5°$. The pressure contours for the NACA 0012, Mach = 0.2 and $\alpha = 0°$, are presented in Fig. 8.

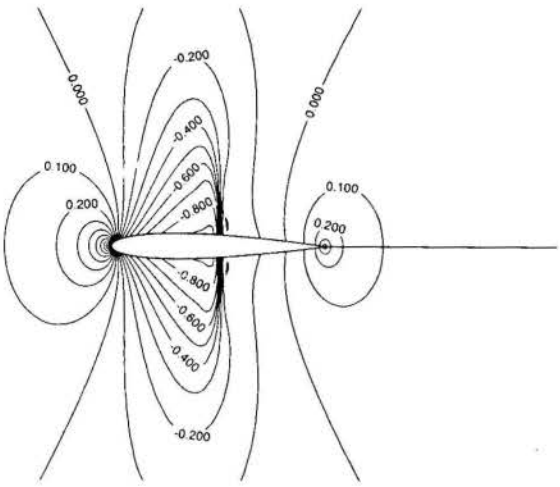


Fig. 6 Pressure contours for NACA 0012, Mach=0.8 and α=0°

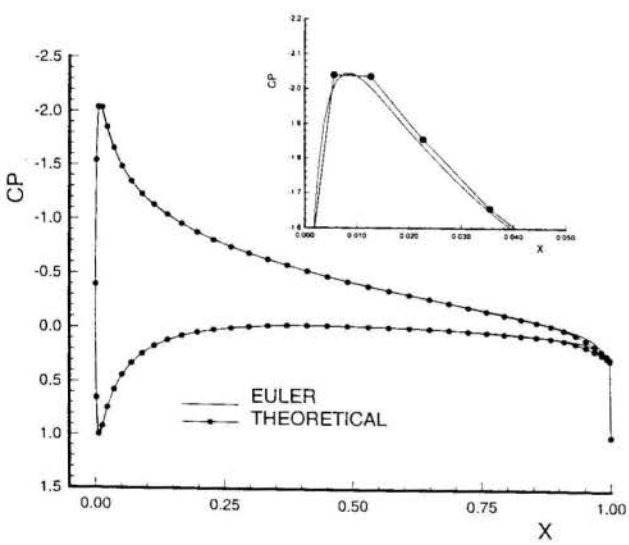


Fig. 7 Pressure coefficient for NACA 0012, Mach = 0.005 and $\alpha = 5°$

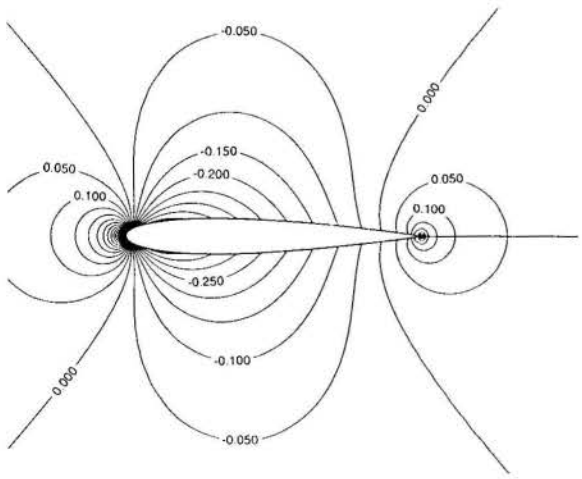


Fig. 8 Pressure contours for NACA 0012, Mach = 0.2 and $\alpha = 0°$

Fig. 9 compares the convergence history for Mach = 0.1 with and without the use of multigrid techniques. Finally, Fig. 10 shows the convergence history of the lift coefficient obtained for Mach = 0.1 and $\alpha = 5°$ with and without multigrid. It turns out that the multigrid technique helps to accelerate the convergence to obtain steady state solutions.

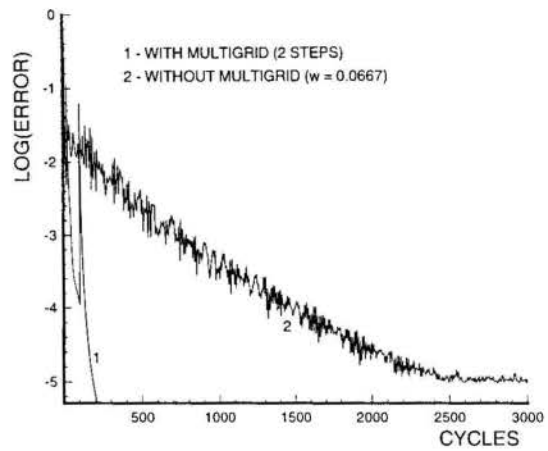


Fig. 9 Convergence history for NACA 0012 with and without multigrid techniques, Mach = 0.1

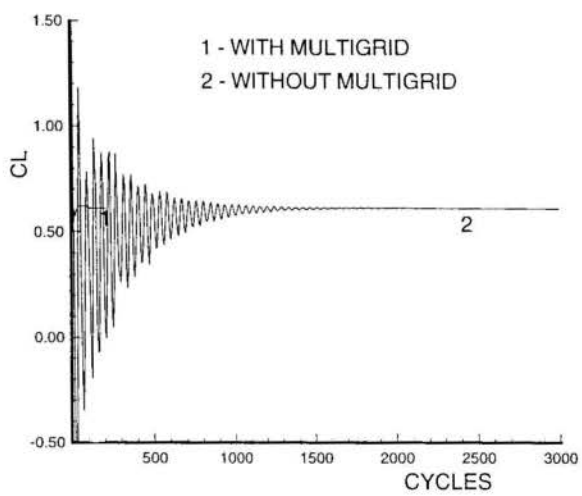


Fig. 10 Convergence history for different grids for NACA 0012, Mach= 0.8 and $\alpha = 1.25°$

The analysis of these results indicates that the present methodology can be employed to solve compressible and incompressible fluid flows accurately.

CONCLUSIONS

Extensive numerical tests have shown that a numerical methodology based on the finite volume spatial discretization and the Runge-Kutta time-stepping scheme and on preconditioning can be used to solve compressible as well as incompressible fluid flows. Accuracy and reliability of the code have been tested in computing subsonic and transonic flows around airfoils. In this work, numerical results for a three dimensional channel and the NACA 0012 are presented and compared.

The preconditioning (Choi and Merkle, 1985) is applicable not only to incompressible flows, but also to compressible flows with incompressible regions. Such a method allows to get the goal of compressible and incompressible solution of fluid flows.

Special care has been taken on the treatment of influence coefficients used to obtain the time-step, the artificial dissipation and to evaluate the far field boundary conditions.

Obtained results indicate that it is possible and preferable to accelerate the convergence to obtain steady state solutions using the multigrid technique. However, for low Mach flows the efficiency of this technique was not so big as for transonic flows. Besides, two time-steps were necessary at each grid, in order to efficiently use the multigrid for the solution of low speed flows.

It is the author opinion that the comparison between the theoretical and numerical solutions is encouraging. Especially the use of multigrid techniques and its combination with preconditioning present good convergence rates. Therefore, the same code can be employed to solve compressible as well as incompressible flow problems.

ACKNOWLEDGEMENT

This work has been supported by "CNPq" and carried out at the Federal University of Rio Grande do Sul ("UFRGS"). Cray YMP 2E time was provided by CESUP "Centro Nacional de Supercomputação" of this university. The author is grateful to "CNPq" for this support and to "UFRGS" for this opportunity.

REFERENCES

BLAZEK, J., 1994, "Verfahren zur Beschleunigung der Lösung der Euler- und Navier-Stokes Gleichungen bei Stationären Über- und Hyperschallströmungen", Ph.D. Thesis, University of Braunschweig.

BRANDT, A., 1981, "Guide to Multigrid Development", Multigrid Methods I, Lecture Notes in Mathematics.

CHOI, D., MERKLE, CL., 1985, "Application of Time-Iterative Schemes to Incompressible Flow", AIAA Journal, Vol. 23, No. 10, pp. 1518-1524.

CHOI, Y.H., MERKLE, C.L., 1993, "The Application of Preconditioning in Viscous Flows", Journal of Computational Physics 105, pp 207-223.

DE BORTOLI, A.L., 1994, "Solution of Incompressible Flows Using Compressible Flow Solvers", DLR IB 129-94/18, Braunschweig, Germany.

JAMESON, A., 1985, "Multigrid Algorithm for Compressible Flow Calculations", Multigrid Methods, Lecture Notes in Mathematics, Cologne, Germany.

JAMESON, A., SCHMIDT, W., TURKEL, E., 1981, "Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes", AIAA Paper 81-1259.

KROLL, N., JAIN, P.K., 1987, "Solution of Two-Dimensional Equations-Experience with a Finite Volume Code", Forschungsbericht, DFVLR-FB 87-41, Braunschweig, Germany.

KROLL, N., ROSSOW, C.-C., 1989, "Foundations of Numerical Methods for the Solution of Euler Equations", Prepared for the Lecture F 6.03 of the CCG, Braunschweig, Germany.

MALISKA, C.R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

MALISKA, C.R., SILVA, A.F.C., 1989, "A Boundary Fitted Finite Volume Method for the Solution of Compressible and Incompressible Fluid Flows Using Both Velocity and Density Corrections", Seventh International Conference on Finite Element Methods in Flow Problems, Hunstwille.

RADESPIEL, R., 1989, "A Cell-Vertex Multigrid Method for the Navier-Stokes Equations", NASA Technical Memorandum 101557.

STORTI, M., NIGRO, N., IDELSOHN, S., 1995, "Steady State Incompressible Flows Using Explicit Schemes with an Optimal Local Preconditioning", Comp. Methods Appl. Mech. Engrg. 124, pp. 231-252.

VAN DOORMAAL, J.P., 1985, "Numerical Method for the Solution of Incompressible and Compressible Fluid Flows", Ph. D. Thesis, University of Waterloo, Canada.

WHITFIELD, D.L., 1983, "Three-Dimensional Unsteady Euler Equation Solutions Using Flux Vector Splitting", MS 39762, Mississippi State University.

A Marker-and-Cell Technique for Solving Axisymmetric Free Surface Flows

ABCM M. F. Tome A. Castelo Fo. J. Murakami J. A. Cuminato

ICMSC-USP, P. O. Box 668 - 13560-970, São Carlos, S.P., Brasil

SUMMARY

Free surface flows appear in various industrial applications such as cavity filling and injection moulding products. A number of researchers have tackled this class of problems but the development of efficient algorithms for simulating such flows yet present some challenges: the flow is transient, non-isothermal, non-Newtonian, three-dimensional and involves free surfaces in complex geometries. In this work we present a finite difference technique for solving axisymmetric free surface flows based on the SMAC (Simplified-Marker-and-Cell) method. The methodology employed is an extension to that embodied in the GENSMAC code for solving two-dimensional free surface flows in general domains. Results demonstrating the applicability of the method for solving complicated cavity filling problems are presented.

1. INTRODUCTION

Modelling of injection moulding has been an area of intensive research over the past two decades, and yet present various challenges: the flow is unsteady, non-isothermal, non-newtonian and involves multiple free surfaces moving through cavities of complex shape. However research has resulted in a variety of computational techniques which have improved the design and manufacture of injection-moulded products. Among the various techniques employed for solving free surface problems, the Marker-and-Cell method (MAC) [1] was one of the first techniques to successfully simulate free surface flow. It is a finite difference solution technique based on a staggered grid for investigating the dynamics of an incompressible viscous fluid. It employs the primitive variables of pressure and velocity, and has particular application to the modelling of fluid flows with free surfaces. It has been developed by various researchers [2], [3], (to cite a few) and a detailed description of the technique can be found in Tome (1993). Recently Tome and McKee (1994) have developed the GENSMAC code which is an updated Marker-and-Cell methodology for solving free surface flows in general domains. It is an extention to the SMAC (Amsden and Harlow, 1971) (Simplified Mark-and-Cell method) for calculating time-dependent free surface flow problems employing pressure and velocity as the primary dependent variables. More specifically, GENSMAC calculates incompressible fluid flows in Cartesian co-ordinates within a general two-dimensional domain.The code is designed to deal with free surfaces flows having free-slip or no-slip rigid boundaries; a number of inflows and outflows can be handled as can any number of internal obstacles. However, although GENSMAC has a wide range of applicability it cannot deal with axisymmetric flows which are often encountered in many industrial applications. In this work we describe the implementation of cylindrical coordinates into the GENSMAC code with the aim of simulating axisymmetric free surface flows. Results demonstrating the applicability of the code to industrial applications are presented. In addition, a graphic interface for providing flow visualization for the code has been developed.

2. BASIC EQUATIONS

We consider incompressible axisymmetric Newtonian flows. The governing equations are the mass and momentum equations which in non-dimensional Cylindrical coordinates conservative form can be written as (Amsden and Harlow, 1971)

$$\frac{1}{r}\frac{\partial(ru)}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial z}=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ru^2)}{\partial r}+\frac{\partial(uv)}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial u}{\partial z}-\frac{\partial v}{\partial r}\right)+\frac{1}{F_r^2}g_r \tag{2}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(ruv)}{\partial r}+\frac{\partial v^2}{\partial z}=-\frac{\partial p}{\partial z}-\frac{1}{Re}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\left(\frac{\partial u}{\partial z}-\frac{\partial v}{\partial r}\right)\right)+\frac{1}{F_r^2}g_z \tag{3}$$

where $Re = UL/\nu$ and $F_r = U/\sqrt{Lg}$ denote the Reynolds number and the Froude number respectively. L and U are the length and velocity scales respectively, ν is a reference viscosity and $g = |\mathbf{g}|$. Further, $\mathbf{u} = (u, v)^T$ are the radial and vertical components of velocity while p is the non-dimensional pressure per unit density.

3. METHOD OF SOLUTION

For solving eqs. (1)–(3) we employ the GENSMAC methodology. A full description for two-dimensional flows can be found in [7].

It is supposed that at a given time t_0, the velocity field $\mathbf{u}(r, z, t_0)$ is known and boundary conditions for the velocity and pressure are given. The updated velocity field $\mathbf{u}(r, z, t)$ at $t = t_0 + \delta t$ is calculated as follows:

1. Let $\tilde{p}(r, z, t)$ be a pressure field which satisfies the correct pressure condition on the free surface. This pressure field is computed according to the stress conditions given in Section 4.2.

2. Calculate the intermediate velocity field $\tilde{\mathbf{u}}(r, z, t)$ from the explicity discretised form of

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = \left[-\frac{1}{r}\frac{\partial(ru^2)}{\partial r} - \frac{\partial(uv)}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} + \frac{1}{F_r^2}g_r + \frac{1}{Re}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}\right)\right]_{t=t_0} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = \left[-\frac{1}{r}\frac{\partial(ruv)}{\partial r} - \frac{\partial(v^2)}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial z} + \frac{1}{F_r^2}g_z - \frac{1}{Re}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\left(\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial r}\right)\right)\right]_{t=t_0} \quad (5)$$

with $\tilde{\mathbf{u}}(r, z, t_0) = \mathbf{u}(r, z, t_0)$ using the correct boundary conditions for $\mathbf{u}(r, z, t_0)$. It can be shown (Tome et al., 1996) that $\tilde{\mathbf{u}}(r, z, t)$ possesses the correct vorticity at time t. However, $\tilde{\mathbf{u}}(r, z, t)$ does not satisfy (1). Let

$$\mathbf{u}(r, z, t) = \tilde{\mathbf{u}}(r, z, t) - \nabla\psi(r, z, t) \quad (6)$$

with

$$\nabla^2\psi(r, z, t) = \nabla.\tilde{\mathbf{u}}(r, z, t) \ . \quad (7)$$

Thus, $\mathbf{u}(r, z, t)$ now satisfies (1) and the vorticity remains unchanged. Therefore, $\mathbf{u}(r, z, t)$ is identified with the updated velocity field at time t.

3. Solve the Poisson equation (7)

4. Compute the velocity (6)

5. Compute the pressure. It can be shown (see Tome et al., 1996) that the pressure is given by

$$p(r, z, t) = \tilde{p}(r, z, t) + \psi(r, z, t)/\delta t$$

6. Update the marker-particles positions

The last step in the calculation involves moving the marker particles to their new positions. These are virtual particles whose coordinates are stored and updated at the end of each cycle by solving

$$\frac{dr}{dt} = u \ , \qquad \frac{dz}{dt} = v$$

by Euler's method. This provides a particle with its new coordinates, allowing us to determine whether or not it moved to a new computational cell or if it leaved the containment region through an outlet.

3.1 Boundary Conditions

Boundary conditions must be imposed both on fixed boundaries and on free surfaces. On fixed boundaries we can impose no-slip, free-slip, prescribed inflow, prescribed outflow and continuative outflow (for details see Tomé [3], [4]). The implementation of these boundary conditions is performed in the same way as in the GENSMAC code. The appropriate free surface boundary conditions are the vanishing of the normal and the tangential stresses which in the absence of surface tension are (see [6]):

$$\mathbf{n} \cdot \sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (8)$$

$$\mathbf{m} \cdot \sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad (9)$$

where $\mathbf{n}$ and $\mathbf{m}$ are local unit normal and tangential vectors and σ is the stress tensor. These conditions are applied by making accurate local finite difference approximations on the free surface (Tome and McKee, 1994) and will be given in Section 4.2. The appropriate boundary condition for the Poisson equation (7) (see Amsden and Harlow, 1971) is

$$\frac{\partial\psi}{\partial n} = 0 \text{ on fixed boundaries and } \psi = 0 \text{ on free surfaces}$$

4. BASIC FINITE DIFFERENCE EQUATIONS

To implement the method presented in Section 3 we employ the finite difference method as follows.

A staggered grid is employed. A typical cell is as shown in Fig. 1.

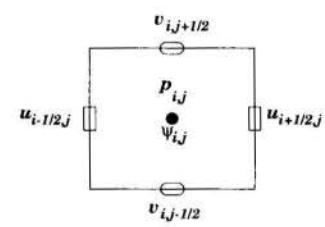


Fig. 1. Computational cell.

The variables pressure $\tilde{p}_{i,j}$ and the added velocity potential $\psi_{i,j}$ are positioned at the cell centre while $u_{i,j}$ and $v_{i,j}$ are staggered by a translation of $\delta r/2$ and $\delta z/2$ respectively.

The momentum equations (4) and (5) are discretized and applied at the u-nodes and v-nodes respectively. A forward difference in time is used for the time derivatives and the linear spatial terms on the right-hand side are approximated by central differences; for the convection terms in (4) and (5) the ZIP (see [2]) form is adopted. For the flux terms (uv), simple averages are performed, for instance

$$(uv)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1}}{2}\,\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}}}{2}$$

Thus, the finite difference approximations to (4) and (5) become (Amsden and Harlow, 1971)

$$\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} = u_{i+\frac{1}{2},j} + \delta t \left[\frac{u_{i+\frac{1}{2},j}}{r_{i+\frac{1}{2}}\delta r} \left(r_i u_{i-\frac{1}{2},j} - r_{i+1} u_{i+\frac{3}{2},j} \right) \right.$$
$$+ \frac{1}{4\delta z} \left((u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j-1})(v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i+1,j-\frac{1}{2}}) \right.$$
$$\left. - (u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1})(v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i+1,j+\frac{1}{2}}) \right)$$
$$+ \frac{\tilde{p}_{i,j} - \tilde{p}_{i+1,j}}{\delta r} + \frac{1}{Re} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} + u_{i+\frac{1}{2},j-1} - 2u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta z^2} \right.$$
$$\left. \left. - \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i+1,j-\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta r \delta z} \right) + \frac{1}{F_r^2} g_r \right], \quad (10)$$

$$\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j+\frac{1}{2}} + \delta t \left[\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}}(v_{i,j-\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{3}{2}})}{\delta z} \right.$$
$$+ \frac{1}{4r_i \delta r} \left(r_{i-\frac{1}{2}}(u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j+1})(v_{i-1,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}}) \right.$$
$$\left. - r_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j+1})(v_{i+1,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}}) \right)$$
$$\frac{\tilde{p}_{i,j} - \tilde{p}_{i,j+1}}{\delta z} - \frac{1}{Re} \frac{1}{r_i \delta r} \left(r_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta z} \right. \right.$$
$$\left. - \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\delta r} \right) - r_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{i-\frac{1}{2},j+1} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta z} \right.$$
$$\left. \left. \left. - \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\delta r} \right) \right) + \frac{1}{F_r^2} g_z \right]. \quad (11)$$

The Poisson equation (7) in Cylindrical coordinates becomes

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \tilde{D} \quad (12)$$

where

$$\tilde{D} = \frac{1}{r}\frac{\partial (r\tilde{u})}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial z}.$$

At this point we point out that the direct discretization of (12) would lead to a nonsymmetric linear system which would be solved by the bi-conjugate gradient method. However, by rewriting (12) as

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + r \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = r\tilde{D} \quad (13)$$

and discretizing (13) at the surface cell centre we obtain

$$-r_i \psi_{i,j-1} - r_{i-\frac{1}{2}} \psi_{i-1,j} + 4r_i \psi_{i,j} - r_{i+\frac{1}{2}} \psi_{i+1,j} - r_i \psi_{i,j+1}$$
$$= -r_i \tilde{D}_{i,j}, \quad (14)$$

where

$$\tilde{D}_{i,j} = \frac{1}{r_i} \left(\frac{r_{i+\frac{1}{2}} \tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta r} \right) + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta z}.$$

It is easily seen that now (14) leads to a linear system possessing a symmetric positive definite matrix. We have employed the conjugate gradient method as implemented in GENSMAC for solving this linear system.

4.1 Cell Flagging

As the fluid is continuously moving, a procedure for identifying the fluid region and the free surface is employed. To accommodate this, the cells within the mesh are flagged according to whether they are surface cells (S), full cells (F), empty cells (E), boundary cells (B), inflow cells (I) and outflow cells (O). A detailed description can be found in Tomé [6]. Figure 2 illustrates these types of cells within the mesh.

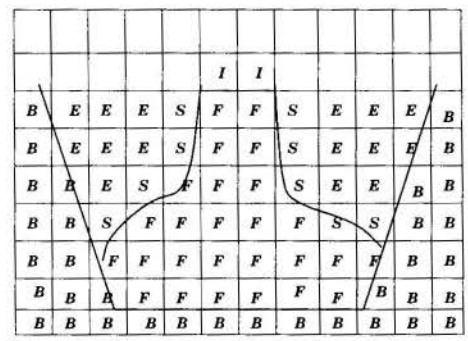


Fig. 2. Types of cells whithin the mesh.

4.2 Free Surface Stress Conditions

The stress conditions (8)-(9) can be written as

$$p - \frac{2}{Re}\left[\frac{\partial u}{\partial r} n_r^2 + \frac{\partial v}{\partial z} n_z^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) n_r n_z \right] = 0, \quad (15)$$

$$\frac{2}{Re}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\partial v}{\partial z} \right) n_r n_z + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right)(n_r^2 - n_z^2) \right] = 0 \quad (16)$$

In order to apply these conditions we follow the approximations adopted by GENSMAC [6]; namely we consider two types of free surface orientations as follows:

a) **Horizontal/vertical surfaces:** These surfaces are identified by surface cells having only one side contiguous with empty cells. For these cells we assume the normal vector is pointing to the empty cell in which case we take $\mathbf{n} = (n_r, 0)$ or $\mathbf{n} = (0, n_z)$. The choice is made according to which side is contiguous with the empty cell. For instance, if a surface cell has only the top side contiguous with an empty cell (see Fig. 3.) then we take $\mathbf{n} = (0, 1)$. Equations (15) and (16) then reduce to

$$p - \frac{2}{Re}\left(\frac{\partial v}{\partial z} \right) = 0, \quad (17)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) = 0. \quad (18)$$

It can be seen that when computing the tilde velocities through eqs. (10) and (11) the pressure $\tilde{p}_{i,j}$ and the values of $u_{i+\frac{1}{2},j+1}$ and $v_{i,j+\frac{1}{2}}$ at the empty cell faces are required (see Fig. 3). These can be obtained from eqs. (17), (18) and the mass conservation equation (1) as follows: First, by applying (1) at the surface cell centre we get

$$\frac{1}{r_i}\left(\frac{r_{i+\frac{1}{2}} u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}} u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta r} \right)$$
$$+ \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta z} = 0$$

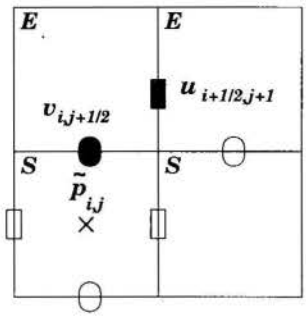


Fig. 3. Surface cell with only the top side contiguous with an empty cell.

which gives

$$v_{i,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j-\frac{1}{2}} - \frac{\delta z}{\delta r}\frac{1}{r_i}\left(r_{i+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}}u_{i-\frac{1}{2},j}\right)$$

Now, discretizing (18) at position $(i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2})$ we obtain

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j+1} - u_{i+\frac{1}{2},j}}{\delta z} + \frac{v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}}{\delta r} = 0$$

which yields

$$u_{i+\frac{1}{2},j+1} = u_{i+\frac{1}{2},j} - \frac{\delta z}{\delta r}\left(v_{i+1,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j+\frac{1}{2}}\right)$$

Once the velocities have been computed the pressure $\tilde{p}_{i,j}$ follows from (17) applied at the surface cell centre, giving

$$\tilde{p}_{i,j} = \frac{2}{Re}\left(\frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta z}\right)$$

Other types of configurations of surface cells having only one side contiguous with empty cells are treated similarly.

b) 45^0–sloped surface: These surfaces are identified by surface cells having two adjacent faces contiguous with empty cells. For these cells we assume that the normal vector makes 45^0 with the axes in which case we take $\mathbf{n} = (\pm\frac{\sqrt{2}}{2}, \pm\frac{\sqrt{2}}{2})$. The sign is chosen according to which faces are contiguous with empty cells. For instance, let us consider the surface cell in Fig. 4.

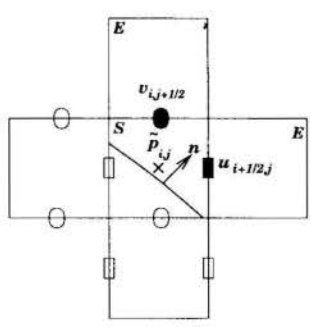


Fig. 4. Surface cell having the top and right sides contiguous with empty cells.

For this cell we take $\mathbf{n} = (\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2})$ and introducing it into (15) and (16) we obtain

$$p - \frac{1}{Re}\left[\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r}\right)\right] = 0\ , \quad (19)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\partial v}{\partial z}\right) = 0\ , \quad (20)$$

respectively. As we can see in Fig. 4, the values of $u_{i+\frac{1}{2},j}$ and $v_{i,j+\frac{1}{2}}$ are required. These are obtained by applying (20) and the mass conservation (1) at the surface cell centre which gives

$$\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta r} - \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta z} = 0\ , \quad (21)$$

$$\frac{1}{r_i}\left(\frac{r_{i+\frac{1}{2}}u_{i+\frac{1}{2},j} - r_{i-\frac{1}{2}}u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta r}\right) + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta z} = 0\ . \quad (22)$$

Eqs. (21) and (22) provide a (2×2)–linear system for $u_{i+\frac{1}{2},j}$ and $v_{i,j+\frac{1}{2}}$, yielding

$$u_{i+\frac{1}{2},j} = \frac{r_i + r_{i-\frac{1}{2}}}{r_i + r_{i+\frac{1}{2}}}u_{i-\frac{1}{2},j}\ ,$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}} = v_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{\delta z}{\delta r}\left(u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}\right)\ . \quad (23)$$

Once the velocities at the empty cell faces have been computed, the pressure follows from (19) applied at the surface cell centre, giving

$$\tilde{p}_{i,j} = \frac{1}{Re}\left[\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\delta r} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\delta z} + \frac{1}{2}\left(\frac{u_{i+\frac{1}{2},j} + u_{i-\frac{1}{2},j} - u_{i+\frac{1}{2},j-1} - u_{i-\frac{1}{2},j-1}}{\delta z} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} + v_{i,j-\frac{1}{2}} - v_{i-1,j+\frac{1}{2}} - v_{i-1,j-\frac{1}{2}}}{\delta r}\right)\right] \quad (24)$$

Other configurations of surface cells having two adjacent sides contiguous with empty cell the values of u, v and $\tilde{p}$ are obtained similarly.

c) Surface cells with three sides or two opposite sides contiguous with empty cells: These cells do not provide enough information to obtain an appoximation for the unit normal $\mathbf{n}$. If they appear during a calculation we set the pressure equal to zero and adjust at least one velocity on one of the empty cell faces so that mass is conserved. To avoid the appearence of such cells a finer mesh should be employed.

4.3 Particle Movement

In accessing the most time consuming parts of GENSMAC it turned out that the particle movement routine took about fourty percent of the total time. This is due to the staggering number of particles needed to represent the fluid properly. A new technique was devised based on representing the fluid by its boundary

using a set of ordered lists which defines the interior and exterior of the region containing the fluid. Each list stores a connected component of the fluid and each of its nodes stores information concerned with the position of the particle the type of the cell it is located in and the type of movement it can be performed on it. For instance a node of type "inflow" cannot move, whereas a node of type "surface" can move freely according to the velocity field. The fluid movement is obtained by solving the equations $\dot{r} = u(r,z)$, $\dot{z} = v(r,z)$, where u, v are the velocities in the r and z directions respectively. As u and v are defined on a staggered grid, the velocity in each node is obtained from bilinear interpolation using the 4 nearest velocities.

5. VISFREEFLOW

Computational Fluid Dynamics is characterised by the ample use of Computer Graphics resources in order to analyse and validate results from its simulations. In connection with the GENSMAC fluid flow code developed by Tome and Mckee ([4]), a visualisation package has been implemented that provides facilities for collecting domain data and flow parameters as well as displaying many results of the simulation graphically.

The package we have developed (VisFreeFlow) comprises modules for modelling the flow domain, for parameter reading, and for visualisation of the results.

The modelling module allows for definition of the flow domain. This is realised by a graphical editor comprising a drawing area, command buttons for interaction with the model, configuration options, and file management tools. Each flow domain may be designed using polylines and arcs. Inflows and outflows are specified and displayed using specific colours. Additional interaction techniques are available (like "dragging", "rubberbanding", and reference grid). Domain data can also be input by typing segments in the format accepted by GENSMAC. The domain editor works independently of the simulation process, therefore allowing the same mould to be used in connection with distinct simulations.

The parameter reading module of VisFreeFlow provides a graphical user interface for inputing data, like viscosity, length and velocity scales, etc. This module is based on the XWindows windowing system, with Motif-like dialogue structures. Data validation, data filing, data retrieving, changing and association of flow data options are features readily available within this reading module. This program is also responsible for triggering the simulation process.

The output of the simulation can be graphically displayed with the visualisation module of VisFreeFlow. The possible visualisations include time varying display of flow particles, pressure, temperature and velocity, as well as the cell grid. The fluid flow is visualised using several techniques: particle tracing, boundary tracing and space-filling. Pressure can be visualised using isolines, as well as colour mapping of pressure ranges. The velocity field is visualized by vector plots that represent direction and intensity. Intensity can also be visualised using isolines as for pressure plots. The parameters for all the visualisation options can be interactively changed to achieve a good display. Multiple viewing is available by use of different windows or by "layering" plots together. Zoom in and out can also be obtained to support analysis of details.

6. NUMERICAL CALCULATIONS

As we can see in the procedure described in Section 3, the inclusion of Cylindrical coordinates into the GENSMAC code will only affect steps 1, 2 and 3. Steps 4, 5 and 6 remain the same as the equations do not change from those for two-dimensional flows. Thus, a routine for calculating the pressure field $\tilde{p}(r,z,t)$ according to the equations for the stress conditions (see Section 4.2) was written as well as a routine for computing the tilde velocities through eqs. (10) and (11). The discretized Poisson equation (14) has been solved by the conjugate gradient routine employed by GENSMAC; for this it was necessary to write a routine for assembling the matrix and the corresponding right hand vector. Finally, regarding the boundary conditions for $\mathbf{u}(r,z,t)$, a routine for computing the velocities on empty cell faces according to the equations described in Section 4.2 was written. The equations for calculating the tangential velocities at the free surface are the same for two-dimensional flows. The boundary conditions on rigid boundaries have been handled in the same manner as for two-dimensional free surface flows as implemented in GENSMAC (for details see [4]).

To illustrate the applicability of this new technique implemented in GENSMAC being able to handle complicated flow regimes we have applied the code to simulate the cavity filling of a "circular tub". This is a common problem encountered in the food industry and there is interest in predicting the flow behaviour during the filling stage. For circular tubs, a circular nozzle from which the fluid is injected into the tub is employed (see Fig. 5a). The flow is assumed to be axisymmetric and the flow domain is taken to be as shown in Fig. 5b.

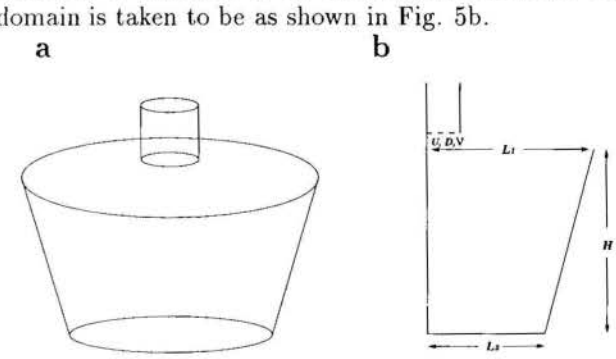


Fig. 5. The filling of a circular tub.

To simulate the filling of the tub we have run the code with the following input data: $U = 1.0$ ms^{-1} (nozzle velocity), $\nu = 0.01$ m^{2}s, $D = 16$ mm (nozzle diameter). This gives a Reynolds number of $Re = UD/\nu = 1.6$ and

$1/F_r^2 = 0.01$. The flow domain was defined by setting (see Fig. 5b) $L_1 = 5$ cm, $L_2 = 6$ cm and $H = 6$ cm. The nozzle is set at a distance of 1 cm above the tub. A mesh spacing of $\delta r = \delta z = 1$ mm was employed, giving a mesh size of 50×80 cells. Thermal effects were neglected. Usually the fluid is non-Newtonian; the extension of this technique to non-Newtonian fluids (eg. power-law, Cross model) is under development. Figure 6 displays several snapshots of the flow configuration (with a mirror image to the left to give a complete picture) at different times.

To further demonstrate the code can cope with complex geometries we have simulated the filling of the container shown in Fig. 7. The data employed for this run were: $U = 1.0$ ms^{-1} (nozzle velocity), $\nu = 0.005$ m^{2}s, $D = 12$ mm (nozzle diameter). Figure 7 displays the flow configuration at different times.

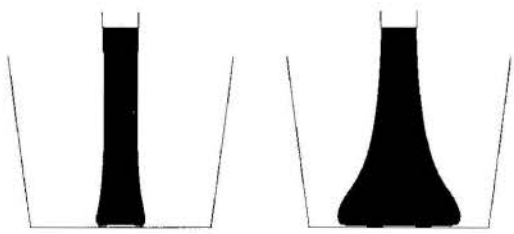


Fig. 6. The filling of a circular tub: Fluid plots at different times.

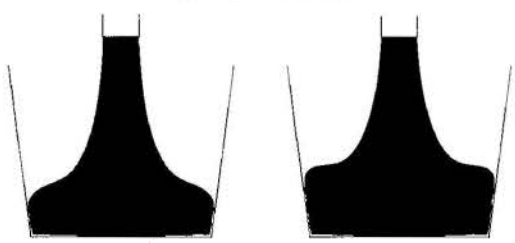


Fig. 6. Continued.

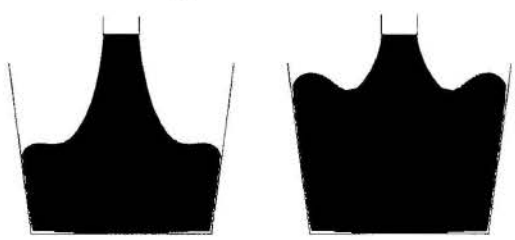


Fig. 6. Continued.

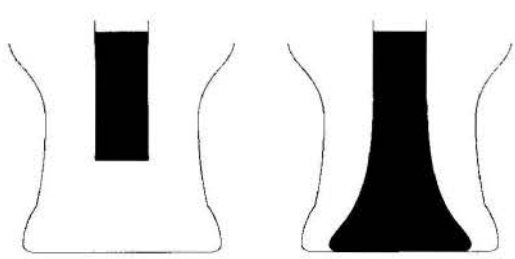


Fig. 7. The filling of a complex shaped container: Fluid plots at different times.

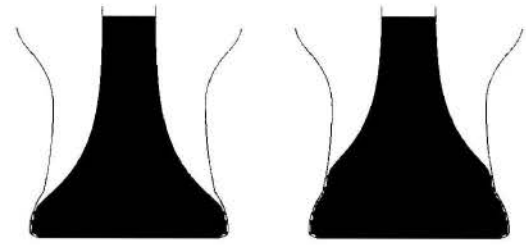


Fig. 7. Continued.

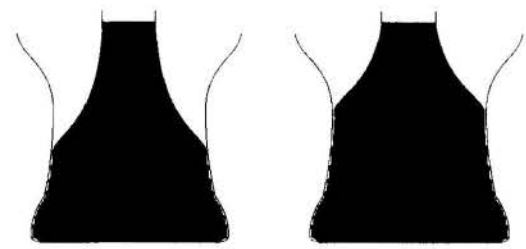


Fig. 7. Continued.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank Dr. Saulo M. Barros of Department of Applied Mathematics of IME–USP for useful discussions on solving the Poisson equation using cylindrical coordinates and the staff of the Icad–USP de São Carlos for their support to this project. This work has been supported by FAPESP - Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo and CNPq - Conselho Nacional de Pesquisa. This research has been part of project PRAXIS XXI under grant 2/2.1/MAT/380/94.

References

[1] Harlow, F. and Welsh, J. E., 1965, "Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with a Free Surface", *Physics of Fluids*, Vol. 8, pp. 2182-2189.

[2] Amsden,A. A. and Harlow, F. H., 1971, "The SMAC Method: A Numerical Technique for Calculating Incompressible Fluid Flow", Los Alamos Scientific Lab., Report LA-4370, Los Alamos, New Mexico.

[3] Hirt, C. W. and Shannon, J. P., 1968, "Free-Surface Stress Conditions for Incompressible-Flow Calculations", *Journal of Computational Physics*, Vol. 2, pp. 403-411.

[4] Tome, M. F., 1993, GENSMAC: A Multiple Free Surface Fluid Flow Solver, Ph.D. Thesis, University of Strathclyde, Glasgow, U.K.

[5] Tome, M. F. and McKee, S., 1994, "GENSMAC: A Computational Marker-and-Cell Method for Free Surface Flows in General Domains", *Journal of Computational Physics*, Vol. 110, pp. 171-186.

[6] Tome, M. F., Duffy, B. and McKee, S., 1996, "A Numerical Technique for Solving Unsteady non-Newtonian Free Surface Flows", *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 62, pp. 9-34

ABCM

APPLICATION OF THE OPTIMIZED MODIFIED STRONG IMPLICIT PROCEDURE TO NON-LINEAR PROBLEMS

Paulo L. C. Lage
Programa de Engenharia Química
COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro
Ilha do Fundão, C.P. 68502, CEP 21.945-970
Rio de Janeiro, RJ, Brazil

SUMMARY

This paper applies a recently developed iterative method to solve the system of equations obtained from the discretization of non-linear two-dimensional field problems. This method is the modified strong implicit procedure with an adaptive optimization algorithm applied to its iteration parameter, which eliminates the "trial-and-error" method usually necessary to determine its optimum value. Four non-linear heat transfer problems are used to test the new method. The results show that the optimized MSI procedure is usually faster than the original method even when the latter is used with the best value of its iteration parameter.

INTRODUCTION

The finite-difference or finite-element discretization of two-dimensional field problems leads to large sparse systems of algebraic equations that have to be solved by iterative methods. Among the existing iterative methods (Aziz and Settari, 1979), the modified strong implicit procedure (MSIP), developed by Schneider and Zedan (1981) is usually considered the one with best convergence behavior.

Like other methods, the MSIP has an iteration parameter which has to be previously chosen. The convergence characteristics of the iterative methods is strongly influenced by the value (or values) chosen for the iteration parameter, which usually shows an optimum value (or a sequence of optimum values during iteration) for each problem. Although the MSIP is the least sensitive to the value of its iteration parameter, its optimization can accelerate the convergence appreciably. Since the search of the best value for the iteration parameter has been done by a trial-and-error procedure, its is not worthwhile unless the problem has to be solved several times. Besides, for non-linear problems, its optimum value may vary during problem solution. This explains why some implementations of the MSI procedure hold the iteration parameter constant for every problem (Güçeri, 1991).

Recently, Lage (1996) developed an adaptive optimization algorithm to search for the best value of the iteration parameter during the problem solution using the MSIP. His results for the solution of five linear heat transfer problems show that the optimized MSI procedure (OMSIP) is almost as fast as the original MSI procedure with its best iteration parameter. For a non-optimal value of the iteration parameter, the OMSIP was faster than the MSIP in almost all the cases analyzed.

The present work applies the optimized MSI procedure to four non-linear two-dimensional heat transfer problems. Two of them are steady-state problems and the other two are the corresponding time-dependent problems. The results will be compared to those obtained by using the original MSI procedure. This comparison demonstrates the advantages of the application of the MSI procedure with adaptive optimization over the standard MSI procedure for non-linear field problems. Moreover, it is shown that, for steady-state problems, the optimized MSI procedure is faster than the original procedure with its optimum iteration parameter.

THE STANDARD MSI PROCEDURE

The MSI procedure developed by Schneider and Zedan (1981) will be outlined in this section. Further details can be found in the original work. The discretization of the two-dimensional field problem will lead to the system of algebraic linear (or linearized) equations

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b} \tag{1}$$

where the coefficient matrix $\mathbf{A}$ is pentadiagonal or nine-diagonal. The MSI procedure consists of the definition of an auxiliary matrix $\mathbf{B}$, which is chosen in order that the modified coefficient matrix $\mathbf{A}+\mathbf{B}$ has an LU factorization where the upper and lower triangular matrices keep the sparse structure of $\mathbf{A}$. The definition of $\mathbf{B}$ includes a partial cancellation factor, α, which tries to minimize the difference between the modified and original systems of equations. This is the iteration parameter of the MSI procedure. It should be noted that the LU decomposition of the modified matrix is calculated by a very fast algorithm. Once α is chosen, $\mathbf{B}$ is determined and the following iterative procedure is applied

$$(\mathbf{A}+\mathbf{B})\cdot\mathbf{x}^{n+1}=(\mathbf{A}+\mathbf{B})\cdot\mathbf{x}^{n}-\left(\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}^{n}-\mathbf{b}\right) \tag{2}$$

Since $\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{L}\cdot\mathbf{U}$ and defining the difference vector $\delta^{n+1}=\mathbf{x}^{n+1}-\mathbf{x}^{n}$ and the residual vector $\mathbf{R}^{n}=\mathbf{b}-\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}^{n}$, the iteration step consists of the solution of

$$(\mathbf{L}\cdot\mathbf{U})\cdot\delta^{n+1}=\mathbf{R}^{n} \tag{3}$$

which is obtained by a two-step process consisting of a forward substitution followed by a backward substitution.

MSIP ASYMPTOTIC RATES OF CONVERGENCE

In order to optimize the iteration parameter of the MSI procedure, it is necessary to define a measure of the convergence characteristics of the MSI procedure for a given value of its iteration parameter. It has been found (Lage, 1996) that there

exists an asymptotic convergence rate for the sequence of the arithmetic means of the norm of the residual vector

$$F(\alpha) = \lim_{n\to\infty} g_n \tag{4}$$

where

$$g_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f_k \qquad \text{and} \qquad f_k = \frac{\|R^k\|}{\|R^{k-1}\|} \tag{5}$$

Since sequence of arithmetic means converges too slowly to be used in an adaptive optimization procedure, a faster estimate of the asymptotic convergence rate has been obtained through a smoothed value of f_n after a few iterations

$$F(\alpha) \approx \lim_{n\to\infty} g_n^N \qquad \text{where} \qquad g_n^N = \frac{1}{N}\sum_{k=n+1-N}^{n} f_k \tag{6}$$

where N = 4 has shown to be a good choice (Lage, 1996). The procedure for the estimation of the asymptotic rate of convergence is explained elsewhere (Lage, 1996).

THE ADAPTIVE OPTIMIZATION PROCEDURE

Once estimates of the asymptotic convergence rate become available for some values of the iteration parameter, an algorithm should be used to determine a better value for the iteration parameter for the next LU decomposition. The details of this algorithm are described by Lage (1996). It has been found in the present work that, for non-linear problems, the algorithm performs better if the tolerances for $F(\alpha)$ determination (ε) and for accepting a new α value (ε_α) are increased from 0.001 to 0.01. The interval for searching the best α value is still [0.01, 0.99].

DESCRIPTION OF TEST PROBLEMS

In order to test the OMSIP for non-linear problems, Test Problems 1 and 4 of Lage (1996) (originally presented by Stone. 1968, and Schneider and Zedan, 1981, respectively) are modified by adding a temperature-dependent thermal conductivity to give our present steady-state non-linear problems 1 and 2, respectively. Then, the corresponding transient problems are also solved. For the sake of completeness, these test problems are described below.

The basic equation to be solved is the heat transfer equation in Cartesian coordinates in a two-dimensional domain with a medium that might have temperature-dependent thermal conductivity, given by

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial T}{\partial y}\right) + Q \tag{7}$$

which is discretized using the control-volume technique. The above equation is assumed to be in a dimensionless form.

Steady-state Problem 1. The domain is a square with side length one completely insulated. There are point heat sources located at (0.1,0.1), (0.1, 0.9), (0.767,0.133), (0.467,0.5) and (0.9,0.9) with strengths 1.0, 0.5, 0.6, -1.83 and -0.27, respectively. Besides,

$$k(T) = exp(-0.23T) \tag{8}$$

which corresponds to a dimensionless iron conductivity between 200 and 1000K. The initial guess for the temperature field is the uniform field with T = 0.

Steady-state Problem 2. The domain is $0 < x < 2$, $0 < y < 1$. The two vertical sides at x = 0, 2 are insulated. The side at y = 0 is insulated for $1 < x < 2$ and receives a uniform heat flux $q_y = 1$ for $0 < x < 1$. The upper boundary at y = 1 is subjected to a boundary condition of the third kind, with a convective heat transfer coefficient of 5, loosing heat to an ambient at zero temperature. Besides, the thermal conductivity is given by Eq. (8) and the initial guess is the uniform field with T = 0.

Transient Problems 1 and 2. They are the transient problems of the above steady-state problems for an initial uniform temperature field of zero and with $\rho c_p = 1$. The fully-implicit scheme is used in the control-volume discretization.

These test problems have been solved in a fixed 30 x 30 mesh (identical to the one used by Stone, 1968). For the transient problems, the time interval in the finite-difference discretization was varied, for each problem, in order to give 10, 20 and 100 time points during the transient solution. The time necessary to practically reach the steady state was found to be t = 2 for the first problem and t = 8 for the second one.

During the solution of all problems, the following convergence criterion was used

$$\frac{\left|T^{(n)} - T^{(n-1)}\right|}{\varepsilon_r\left|T^{(n)}\right| + \varepsilon_a} < 1 \tag{9}$$

for every point in the field, where $\varepsilon_r = 10^{-4}$ and $\varepsilon_a = 10^{-6}$. Since these problems are non-linear, the coefficient matrix of the discretized system of equations has to be updated during the solution of the steady-state problems or during a time-step fully-implicit integration of the transient problems. The iteration scheme applied to both cases, using either the MSIP or the OMSIP, is given in Fig. 1. In this figure, the iterative method

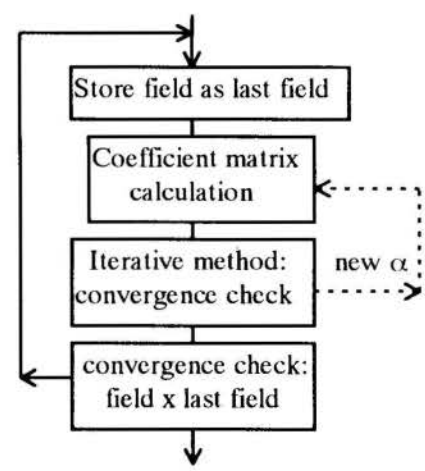


Figure 1 - Iterative scheme for non-linear problem solution (the path with dashed line occurs only when using the OMSIP).

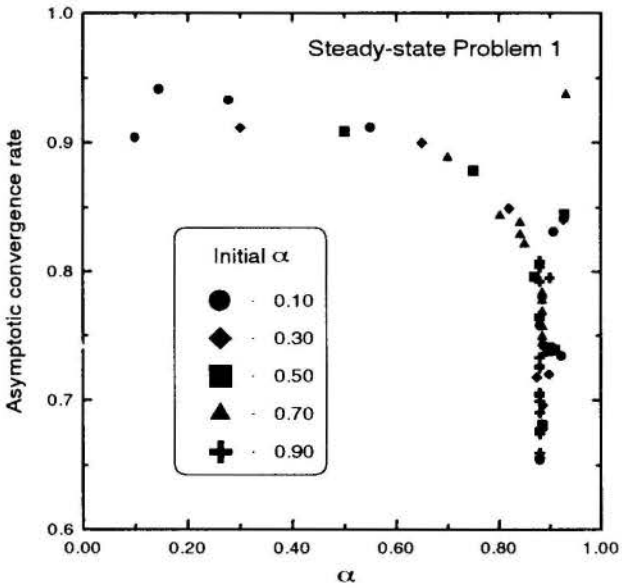


Figure 2 - Asymptotic convergence rate for the steady-state test problem 1.

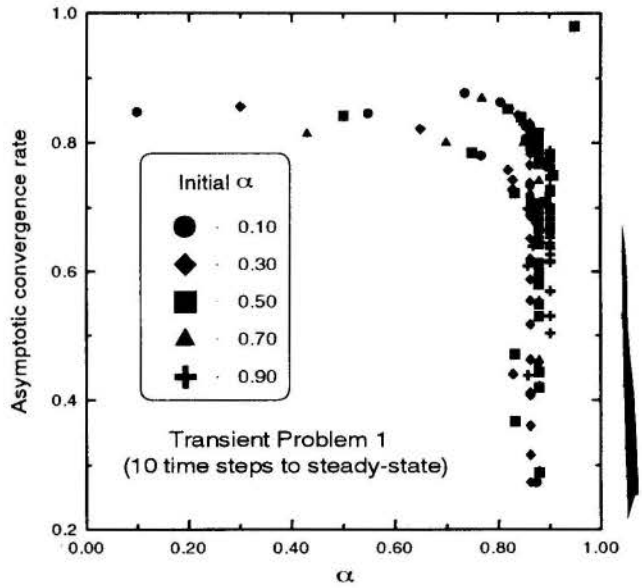


Figure 4 - Asymptotic convergence rate for the transient test problem 1.

(MSIP or OMSIP) is applied until the convergence criterion given by Eq. (9) is met internally. Then, the temperature field is checked against the temperature field in the beginning of the iteration. If the convergence criterion given by Eq. (9) is not met a new iteration is started, otherwise the steady-state problems are considered to be solved and, for the transient problems, a new time-step integration is then started. The only difference in the iterative scheme is that the OMSIP reevaluate the coefficient matrix each time it chooses a new alpha value.

RESULTS

Since the OMSI procedure is based on the evaluation of the asymptotic rate of convergence, our first aim is verify its behavior during the solution of a non-linear problem. Since the coefficient matrix changes during solution of a non-linear problem, a unique F(α) curve does not exist. However, if the linearity is not too severe one should expect that most of the (α,F) values obtained during problem solution belong approximately to a single curve. For all the problems analyzed, this fact has been verified, as can be seen in Figures 2, 3, 4 and 5, for the steady-problems 1 and 2 and the transient problems 1 and 2, respectively. Figures 2, 3, 4 and 5 show the F(α) values obtained during problem solution with the OMSIP for several initial α values. From these figures, it is clear that there is considerable data scatter due to two factors: (i) the problem non-linearity and (ii) the large tolerance used in F(α) estimation. The same α data is plotted against the total number of iterations (number of times Eq. (3) is solved) in Figures 6, 7, 8 and 9, for the steady-problems 1 and 2 and the transient problems 1 and 2, respectively. It should be noted that only the first 200 iterations

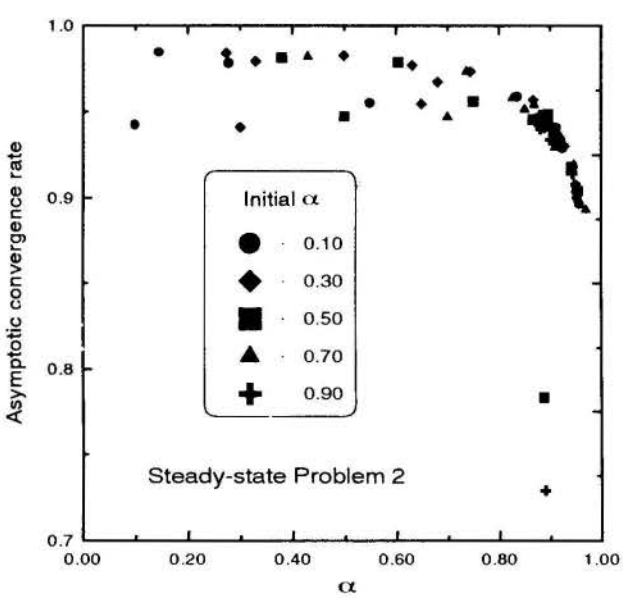


Figure 3 - Asymptotic convergence rate for the steady-state test problem 2.

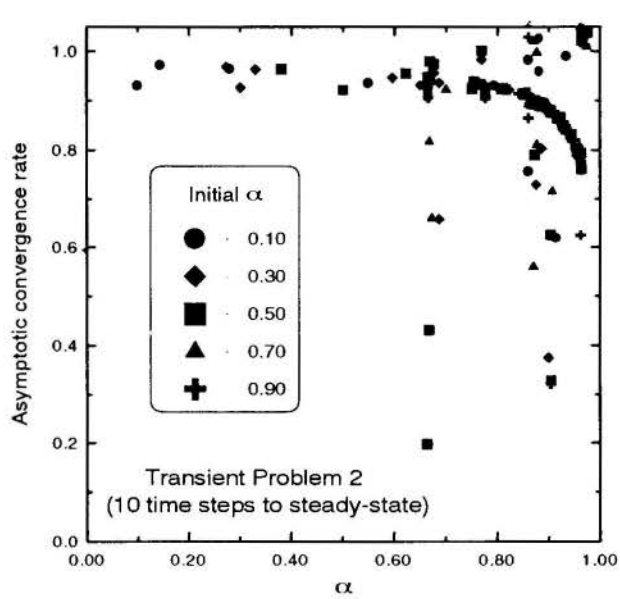


Figure 5 - Asymptotic convergence rate for the transient test problem 2.

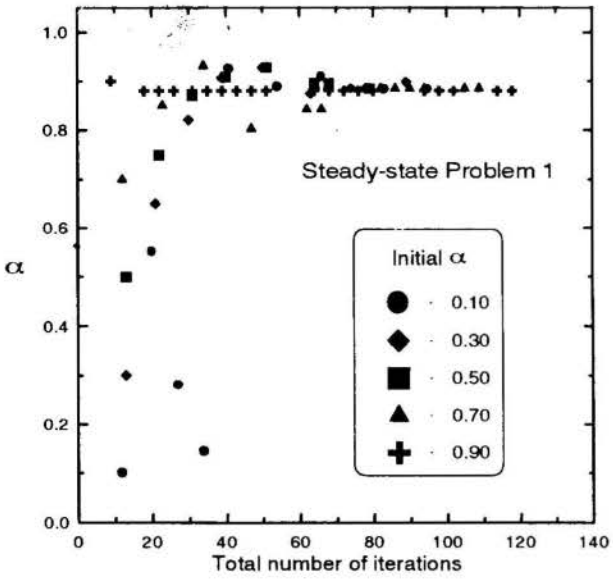


Figure 6 - Behavior of the iteration parameter during solution of steady state test problem 1.

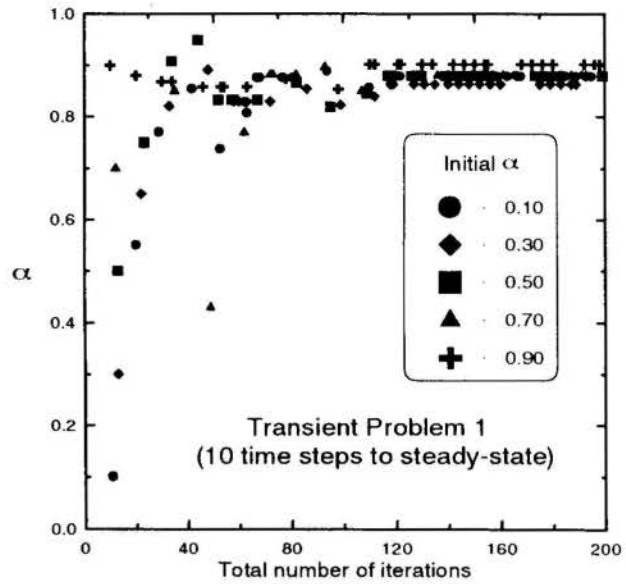


Figure 8 - Behavior of the iteration parameter during solution of transient test problem 1.

are shown in Figures 8 and 9 for the solutions of the transient problems. From these figures, it is clear that the optimization algorithm is able to bring the α value close to its optimum for both problems, even though some oscillations occurs, most of them during the first iterations. Carefully comparing the data on these figures, we find out that the points out of the $F(\alpha)$ curves of Figures 2 and 4 are exactly those obtained for the first iterations as shown in Figures 6 and 8. Thus, the points out of the $F(\alpha)$ curves for the test problem 1 are mainly due to the change in the coefficient matrix during problem solution, even though there exists some error in the evaluation of the asymptotic convergence rates as shown below. This error is much larger for the steady-state and transient solutions of the test problem 2 as can be seen from the large data scatter in Figures 7 and 9.

Figure 10 shows the behavior of f_n during solution of the steady-state problem 1 using the MSI and OMSI procedures, for an initial α value of 0.5. It is clear that the asymptotic rate is reached for the first two calls of the MSI procedure. Those determined by the OMSI procedure have some error, due to the increase in the ε value used in the algorithm. This can be noted by comparing the first call of both procedures and by verifying that the curves for the OMSIP calls barely flatten before the algorithm interrupts the process to choose a new α value. The corresponding results for the steady problem 2 shows a similar behavior but with a somewhat larger error in $F(\alpha)$ estimation.

The comparison between the two methods is shown in Tables 1, 2 and 3, for the steady-state problems, transient problem 1 and transient problem 2, respectively. N_{iter} is the total number of iterations (solutions of Eq. (3)), N_{LU} is the total number of coefficient matrix evaluations followed by its LU decomposition and t_{rel} is the relative CPU time spent for the problem solution. This relative CPU time is based on the fastest

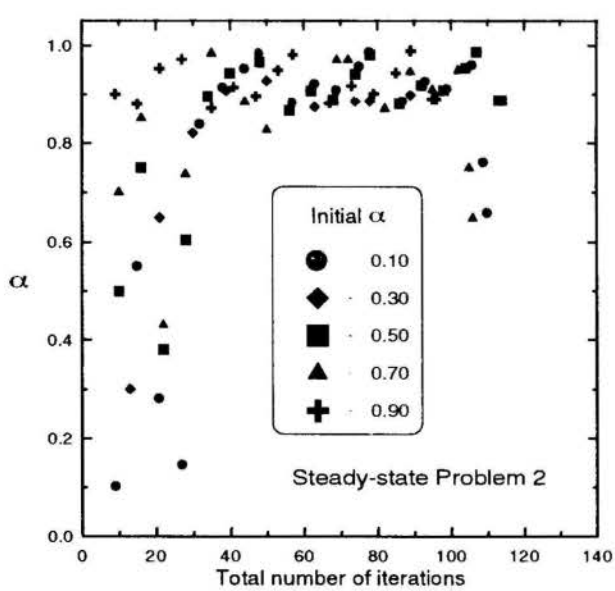


Figure 7 - Behavior of the iteration parameter during solution of steady state test problem 2.

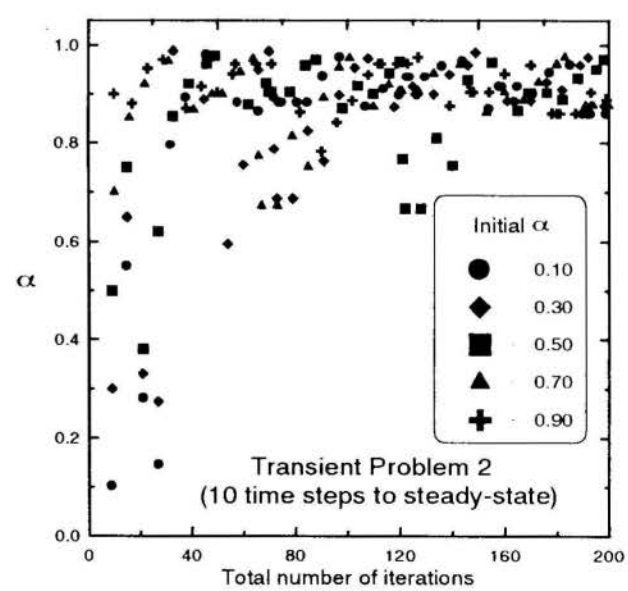


Figure 9 - Behavior of the iteration parameter during solution of transient test problem 2.

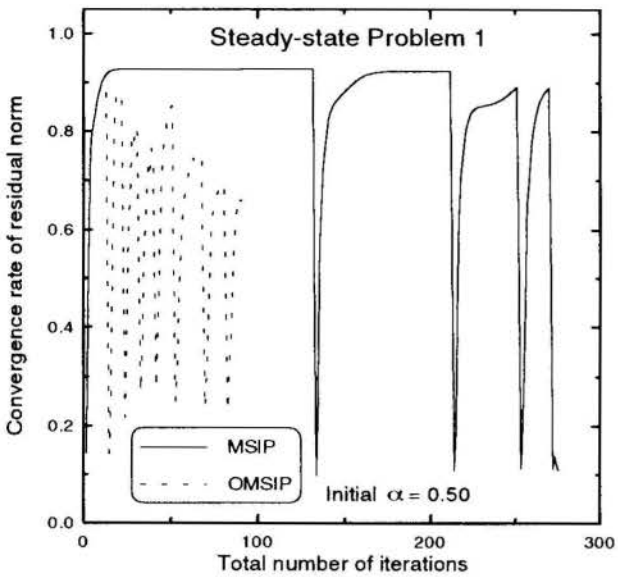


Figure 10 - Behavior of convergence rate during solution of steady state test problem 1.

result for the MSIP for each problem, which was obtained by using $\alpha = 0.9$ for all problems.

For the steady-state problems, as can be seen from Table 1, the OMSIP needs less iterations and is faster than MSIP even for the best α in this table. This direct comparison might not be quite fair because the algorithm of the OMSIP evaluates the coefficient matrix more often than the MSI iterative procedure. That is, during problem solution using the OMSIP, time is saved by not requiring high convergence for non-converged coefficient matrices. For the steady-state problem 1 and $\alpha = 0.9$, both methods evaluate the coefficient matrix seven times, but the OMSIP is still superior to the MSIP. In order to minimize the effect of requiring high convergence before the coefficient matrix converge, the iterative procedure given in Figure 1 is modified by starting it with $\varepsilon_r = \varepsilon_a = 0.05$ and decreasing these values one order of magnitude for every new iteration until the final tolerance values, $\varepsilon_r = 5 \times 10^{-5}$ and $\varepsilon_a = 5 \times 10^{-7}$, have been reached. The steady-state problem has been solved by both methods using this modified iteration algorithm and $\alpha = 0.9$. Both methods need 8 LU decompositions to obtain the solution, whereas the OMSIP needs only 80 iterations while the MSIP

Table 1 - Comparison between methods for the steady-state test problems 1 and 2.

α	MSIP			OMSIP		
	N_{iter}	N_{LU}	t_{rel}	N_{iter}	N_{LU}	t_{rel}
Steady State Problem 1						
0.10	368	7	1.895	107	12	0.641
0.30	327	7	1.702	91	10	0.538
0.50	276	7	1.448	91	9	0.536
0.70	212	7	1.128	120	10	0.678
0.90	185	7	1.000	129	7	0.690
Steady State Problem 2						
0.10	743	6	2.965	110	19	0.630
0.30	667	6	2.663	125	21	0.708
0.50	576	6	2.313	114	19	0.640
0.70	448	6	1.820	106	16	0.573
0.90	240	6	1.000	96	16	0.540

Table 2 - Comparison between methods for the transient test problem 1.

α	MSIP			OMSIP		
	N_{iter}	N_{LU}	t_{rel}	N_{iter}	N_{LU}	t_{rel}
Transient Problem 1 (100 time steps to steady state)						
0.10	1741	307	1.363	1066	317	0.997
0.30	1617	308	1.298	1072	316	1.001
0.50	1463	308	1.216	1081	316	1.007
0.70	1268	312	1.118	1089	316	1.010
0.90	1037	315	1.000	1191	314	1.067
Transient Problem 1 (20 time steps to steady state)						
0.10	1502	81	1.671	733	85	0.954
0.30	1354	81	1.527	889	86	1.117
0.50	1184	82	1.365	741	84	0.960
0.70	953	83	1.1[illegible]1	727	89	0.957
0.90	796	87	1.000	684	90	0.915
Transient Problem 1 (10 time steps to steady state)						
0.10	1468	48	1.881	622	50	0.920
0.30	1324	48	1.714	615	50	0.910
0.50	1147	48	1.504	609	49	0.901
0.70	926	48	1.242	617	48	0.907
0.90	718	49	1.000	629	49	0.917

needs 95 iterations. The relative computation time is $t_{rel} = 0.856$. These results obtained show that the OMSIP is 15% faster than the MSIP, requiring 15% less iterations to achieve convergence. Since both methods evaluate the coefficient matrix the same number of times and the value of α used in both methods vary only slightly (0.88 to 0.90), the difference in performance must be given by the points chosen by the OMSIP to reevaluate the coefficient matrix.

Thus, the difference in performance between the methods is due to two factors: (i) the optimization of α and (ii) the fact that the algorithm used by the OMSIP to choose the points to reevaluate the coefficient matrix is highly effective in reducing the computational time. The reason for this effectiveness is that the coefficient matrix is reevaluated when a new α value is

Table 3 - Comparison between methods for the transient test problem 2.

α	MSIP			OMSIP		
	N_{iter}	N_{LU}	t_{rel}	N_{iter}	N_{LU}	t_{rel}
Transient Problem 2 (100 time steps to steady state)						
0.10	1909	255	1.570	911	264	0.975
0.30	1761	257	1.487	933	264	0.986
0.50	1575	256	1.374	897	264	0.964
0.70	1330	259	1.235	935	262	0.986
0.90	929	261	1.000	911	263	0.971
Transient Problem 2 (20 time steps to steady state)						
0.10	1585	72	2.218	522	106	1.026
0.30	1443	72	2.042	509	104	1.003
0.50	1269	74	1.835	513	105	1.011
0.70	1017	73	1.519	500	103	0.989
0.90	604	71	1.000	518	106	1.023
Transient Problem 2 (10 time steps to steady state)						
0.10	1452	43	2.438	378	71	0.914
0.30	1321	42	2.235	381	74	0.938
0.50	1154	42	1.970	387	75	0.948
0.70	923	42	1.617	374	71	0.910
0.90	530	41	1.000	366	67	0.877

chosen by the algorithm, which only happens when the system is fairly converged. But this is exactly the best point to update the coefficient matrix. Therefore, the comparison of both methods by the results given in Table 1 is really fair. Thus, we can conclude that the OMSIP, for all α values in Table 1, is 30 to 45% faster than the fastest MSIP run ($\alpha = 0.9$). For the same initial value of α, the OMSIP can be 4.7 times faster than the MSIP.

For the transient problems, the initial guess for every time integration is not too far from the converged solution for the next time point. This eliminates part of the effect of the choice of the points to reevaluate the coefficient matrix. Of course, this effect should decrease with the time step, because the initial guess becomes better. Therefore, it is not expected that the OMSIP would be much faster than the MSIP with its best α value due to the extra computational overhead, especially for small time steps. These trends can be seen in Table 2 and 3, where the results for the transient problems 1 and 2 are shown for three different time steps, corresponding to 10, 20 and 100 time integrations before the systems reach their steady-states. Accordingly, the results show that, for 100 time steps, the OMSIP is basically equivalent to the MSIP with its optimum value of iteration parameter, that is, only the optimization of α contributes to the better performance of the OMSIP, which is up to 61% faster than the MSIP for the same initial value of α. As the number of time steps decreases, and so the time step increases, the effect of the choice of the points for the coefficient matrix reevaluations becomes appreciable. For 10 time steps the OMSIP is about 10% faster than the MSIP with its best α value. For the same initial α value, the OMSIP is up to 2.6 times faster than the MSIP.

It is worthy to note that, in all the cases analyzed, the computational time spent by the OMSI procedure to solve a given problem vary less than 25% for $0.1 \leq \alpha \leq 0.9$, being of the order of, or smaller than, the computational time used by the MSI procedure with its optimum value of α.

CONCLUSIONS

The recently developed optimized MSI procedure is applied to non-linear heat transfer problems in this work. From the results obtained, the following conclusions can be drawn:

(i) the OMSI procedure is able to roughly estimate the asymptotic rate of convergence of the residual norm of the system of equations obtained by the discretization of a non-linear problem, during problem solution;
(ii) the $F(\alpha)$ curve can be approximately obtained for problems with weak non-linearity;
(ii) for steady-state problems, the OMSI algorithm also chooses good points to re-evaluate the coefficient matrix;
(iv) due to above item, the OMSIP has shown to be 30-45% faster than the MSIP for the steady-sate problems analyzed;
(v) for transient problems, the OMSI procedure is still effective in optimizing the α value, with a computational time within $\pm 10\%$ of that used by the MSI procedure with the optimum value of its iteration parameter.

ACKNOWLEDGMENTS

The author would like to acknowledge the financial support from CNPq, Grant No. 523777/94-9.

REFERENCES

Aziz, K. and Settari, A., 1979, "Petroleum Reservoir Simulation", 1st ed., Elsevier, New York.

Güçeri, S. I., 1991, "Finite Difference Solution of Field Problems", in C. L. Tucker III (ed.), *Fundamentals of Computer Modeling for Polymer Processing*, chap. 5, pp. 217-229, Hanser Publishers, Munich.

Lage, P. L. C., 1996, "Adaptive Optimization of the Iteration Parameter in the Modified Strong Implicit Procedure", accepted for presentation in the ENCIT/LATCYM 96.

Schneider, G. E. and Zedan, M., 1981, "A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems", *Numerical Heat Transfer*, vol. 4, pp. 1-19.

Stone, H. L., 1968, "Iterative Solution of Implicit Approximation of Multidimensional Partial Differential Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 5, pp. 530-558.

ADAPTIVE OPTIMIZATION OF THE MODIFIED STRONG IMPLICIT PROCEDURE FOR LINEAR FIELD PROBLEM SOLUTION

Paulo L. C. Lage
Programa de Engenharia Química
COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro
Ilha do Fundão, C.P. 68502, CEP 21.945-970
Rio de Janeiro, RJ, Brazil

SUMMARY

This paper develops an algorithm to estimate the asymptotic rates of convergence of the residual vector norm of a system of equations when it is solved by the MSI procedure. This algorithm is used in an adaptive optimization procedure in order to improve the MSIP performance during problem solution. This eliminates the trial-and-error method usually necessary to determine the optimum value of the iteration parameter. Five problems are used to test the new algorithm. The results show that the optimized MSI procedure can be many times faster than the original procedure for a non-optimal value of its iteration parameter.

INTRODUCTION

The numerical solution of field problems using finite-difference or finite-element procedures leads to systems of algebraic equations that have a sparse structure. In the case of two-dimensional problems a pentadiagonal or nine-diagonal coefficient matrix is obtained, depending on the use of a five-point or nine-point discretization scheme, respectively. Since the number of equations in these systems is large, direct methods of solution are usually too costly to be used, and then iterative methods of solution should be chosen.

Several iterative methods are available throughout the literature (Aziz and Settari, 1979). Among them, the most commonly used are: the point successive over-relaxation method (SOR); the line successive over-relaxation method (LSOR); the alternating direction implicit method (ADI), originally developed by Peaceman and Rachford (1955); the strong implicit procedure (SIP), developed by Stone (1968); and the modified strong implicit procedure (MSIP), developed by Schneider and Zedan (1981). The implicitness of the solution method increases in the order of presentation given above, and this is responsible for the better convergence characteristics of the latter methods. All of these methods have an iteration parameter that can be a relaxation factor (SOR, LSOR and ADI) or a partial cancellation factor (SIP and MSIP). The convergence characteristics of each of these methods are strongly influenced by the value (or values) chosen for the iteration parameter, which usually shows an optimum value (or sequence of values during iteration) for each problem. The modified strong implicit procedure is the least sensitive to its iteration parameter, even though its optimization can cause an order of magnitude reduction in computer time for some problems. Moreover, the optimum value of the MSIP iteration parameter is relatively insensitive to problem parameters. Those advantages over the original strong implicit method have been pointed out by Schneider and Zedan (1981) and are the basis for some implementations of the modified strong implicit procedure where the iteration parameter is held constant for every problem (Güçeri, 1991).

Due to these features, the modified strong implicit procedure is usually considered the best method available for the solution of discretized two-dimensional field problems. However, the optimum value of its iteration parameter has to be obtained by a trial-and-error method for each problem. This involves the solution of the problem for several values of the iteration parameter which is costly and becomes prohibitive if the solution is needed for only a few groups of problem parameter values.

The present work develops a method for the adaptive optimization of the iteration parameter in the modified strong implicit procedure, eliminating the trial-and-error optimization method. The method is based on the fact that, for each value of the iteration parameter, an asymptotic convergence rate of the residual vector norm can be determined. In a chosen closed interval for the iteration parameter, inside [0,1], there is a minimum for the asymptotic convergence rate, which corresponds to the optimum value for the iteration parameter. The adaptive optimization of the iteration parameter consists in two steps: (i) an estimate of the asymptotic convergence rate for the current value of the iteration parameter and (ii) an interpolation/extrapolation procedure, based on the previously obtained asymptotic convergence rates, for choosing a new value for the iteration parameter closer to its optimum value.

In the following sections of the paper, the MSI procedure with adaptive optimization of its iteration parameter will be explained in detail. Its results will be compared to those of the standard MSI procedure for five heat transfer test problems. This comparison demonstrates the advantages of the application of the MSI procedure with adaptive optimization over the standard MSI procedure.

THE STANDARD MSI PROCEDURE

The MSI procedure developed by Schneider and Zedan (1981) will be outlined in this section. Further details can be found in the original work. The discretization of the two-dimensional field problem will lead to the system of algebraic linear (or linearized) equations

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1}$$

where the coefficient matrix $\mathbf{A}$ is pentadiagonal or nine-diagonal. The MSI procedure consists of the definition of an auxiliary matrix $\mathbf{B}$, which is chosen in order that the modified coefficient matrix $\mathbf{A}+\mathbf{B}$ has an LU factorization where the upper and lower triangular matrices keep the sparse structure of $\mathbf{A}$. The definition of $\mathbf{B}$ includes a partial cancellation factor, α, which tries to minimize the difference between the modified and original systems of equations. This is the iteration parameter of the MSI procedure. It should be noted that the LU decomposition of the

modified matrix is calculated by a very fast algorithm. Once α is chosen, **B** is determined and the following iterative procedure is applied

$$(\mathbf{A}+\mathbf{B})\cdot\mathbf{x}^{n+1} = (\mathbf{A}+\mathbf{B})\,\mathbf{x}^{n} - \left(\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}^{n} - \mathbf{b}\right) \qquad (2)$$

Since $\mathbf{A}+\mathbf{B} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{U}$ and defining the difference vector $\delta^{n+1} = \mathbf{x}^{n+1} - \mathbf{x}^{n}$ and the residual vector $\mathbf{R}^{n} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\cdot\mathbf{x}^{n}$, the iteration step consists of the solution of

$$(\mathbf{L}\cdot\mathbf{U})\cdot\delta^{n+1} = \mathbf{R}^{n} \qquad (3)$$

which is obtained by a two-step process consisting of a forward substitution followed by a backward substitution.

MSIP ASYMPTOTIC RATES OF CONVERGENCE

In order to optimize the iteration parameter of the MSI procedure, it is necessary to define a measure of the convergence characteristics of the MSI procedure for a given value of its iteration parameter. It has been found that there usually exists an asymptotic convergence rate for the norm of the residual vector, F, which is defined as

$$F(\alpha) = \lim_{n\to\infty} f_n \qquad \text{where} \quad f_n = \frac{\|\mathbf{R}^{n}\|}{\|\mathbf{R}^{n-1}\|} \qquad . \ (4)$$

where f_n is the convergence rate for the last iteration.

Sometimes, this limiting process does not converge because some oscillatory behavior occurs. Thus, it is necessary to generalize the definition of the asymptotic convergence rate to be the limit obtained for the sequence of arithmetic means, that is

$$F(\alpha) = \lim_{n\to\infty} g_n \qquad \text{where} \quad g_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f_k \qquad (5)$$

where g_n is the convergence rate of the sequence of arithmetic means.

Although mathematically correct, the implementation of Eq. (5) shows that the sequence of arithmetic means converges too slowly to be used in an adaptive optimization procedure. A faster estimate of the asymptotic convergence rate has been obtained through a smoothed value of f_n after a few iterations

$$F(\alpha) \cong \lim_{n\to\infty} g_n^{N} \qquad \text{where} \quad g_n^{N} = \frac{1}{N}\sum_{k=n+1-N}^{n} f_k \qquad (6)$$

The value of N depends on the degree of smoothness needed for a specific problem, but a value between 4 and 8 has been proved to be enough for all the cases analyzed. Thus, the first step in the algorithm for adaptive optimization of α, which is the estimation of the asymptotic rate of convergence, has been carried out through the following procedure:

(i) choose an α value and decompose the modified matrix

(ii) iterate to obtain new values of the unknowns, that is, solve Eq. (3)

(iii) determine f_n

(iv) check for divergence ($f_n > 1$) after the second iteration, stopping the iteration process (for the current α value) if it is found

(v) after N+1 iterations check if the asymptotic rate has been reached

$$\left|g_n^{N} - g_{n-1}^{N}\right| < \varepsilon \quad \Leftrightarrow \quad \left|f_n - f_{n-N}\right| < N\varepsilon \qquad (7)$$

where ε is the tolerance in $F(\alpha)$ estimation.

(vi) if the assertion of Eq. (7) is true let that smoothed converged value be the estimate for $F(\alpha)$

THE ADAPTIVE OPTIMIZATION PROCEDURE

Once estimates of the asymptotic convergence rate become available for some values of the iteration parameter, an algorithm can be used to determine a better value for the iteration parameter for the next LU decomposition. This algorithm must have the following characteristics:

- it should try to determine the α value which gives the minimum of $F(\alpha)$, that is, it is an optimization procedure;
- it should use only the latest information for $F(\alpha)$ in order to compensate estimation errors in past $F(\alpha)$ values and coefficient matrix updates in the case of non-linear problems, that is, it is an adaptive algorithm;
- it should be fast enough in order not to cause excessive overhead in the computational implementation of the method.

Thus, a simple second order curve fitting for $F(\alpha)$ was chosen for the adaptive optimization of α. This method satisfies the characteristics cited above because it is fast, uses only the last three values of $F(\alpha)$ and allows the determination of a minimum for $F(\alpha)$. Therefore, the adaptive optimization is carried out by the following procedure:

(i) for the given initial value of α, α_1, decompose de modified matrix and iterate until an estimate of $F(\alpha_1)$ could be made;

(ii) choose another α value, α_2, using the heuristic procedure: $\alpha_2 = 1 - (1 - \alpha_1)/2$, then, if $\alpha_2 > 0.9$ let $\alpha_2 = \alpha_1 - 0.02$; decompose the modified matrix and iterate until $F(\alpha_2)$ is estimated;

(iii) using the values of $F(\alpha_1)$ and $F(\alpha_2)$ obtain, by a linear extrapolation, the α_3 value, using the heuristic condition $F(\alpha_3) = 0.98 \min [F(\alpha_1), F(\alpha_2)] - 0.02$; decompose the modified matrix and iterate until $F(\alpha_3)$ is estimated;

(iv) using the last three estimates for $F(\alpha)$, fit a second degree polynomial in terms of α and determine $F_{min} = \min [F(\alpha_k), F(\alpha_{k-1}), F(\alpha_{k-2})]$ and the corresponding α_{min};

(v) find the new α value, α_{k+1}, as following:

- if the polynomial fit has a minimum inside the interval of interpolation, choose α_{k+1} as the minimum point;
- otherwise, if there are real roots for $F(\alpha) = 0.98\ F_{min} - 0.02$, choose the one nearest to α_{min} as the α_{k+1} value;
- if there is no real root, choose the point of minimum outside the interval of interpolation as the α_{k+1} value (note that the extreme point must be a minimum when $F(\alpha) = 0.98\ F_{min} - 0.02$ has no real roots);

(vi) check if α_{k+1} is inside the interval of allowable α values, $[\alpha^0, \alpha^1]$, if it is greater than α^1, let $\alpha_{k+1} = (\alpha_k + \alpha^1)/2$, it is less than α^0, let $\alpha_{k+1} = (\alpha_k + \alpha^0)/2$

(vii) if $|\alpha_{k+1} - \alpha_k| > \varepsilon_\alpha$, perform the LU decomposition of the modified matrix and iterate until $F(\alpha_{k+1})$ is estimated; otherwise continue to iterate with the current α_k value;

(viii) return to step (iv) while the desired convergence criterion is not met.

If, by any chance, two out of the three α values are equal in step (iv), a linear extrapolation is used, as described in step (iii). The heuristic criterion used for extrapolation simply try to increase the convergence rate, decreasing the value of $F(\alpha)$. In

the present implementation, the following values have been chosen: $\alpha^0 = 0.01$, $\alpha^1 = 0.99$ and $\varepsilon = \varepsilon_0 = 0.001$.

DESCRIPTION OF TEST PROBLEMS

In order to test the new procedure, five heat transfer problems have been selected from the existing literature. Stone (1968) gives four two-dimensional heat transfer problems in a square insulated domain with point heat sources and sinks. His first three problems in a grid with 31 x 31 nodes are our current Test Problems 1, 2 and 3, in the same order. Schneider and Zedan (1981) give three heat transfer problems. One of them is a one-dimensional problem in a square grid with two insulated boundaries which will also be used. Our final test problem, numbered as 4, is the last heat transfer problem presented by Schneider and Zedan (1981), which is a problem in a rectangular domain with boundary conditions of mixed kinds. Since Schneider and Zedan (1981) verify that, for the MSI procedure, the optimum value of α is insensitive to problem parameters, we will not analyze the behavior for different meshes. For the sake of completeness, the five test problems used in this work are described below.

The basic equation to be solved is the steady heat transfer equation in Cartesian coordinates in a two-dimensional domain with a medium that might have anisotropic thermal conductivity, given by

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k_x \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_y \frac{\partial T}{\partial y}\right) = -Q \qquad (8)$$

where T is the temperature, x and y are the Cartesian coordinates, Q is the heat source term and k is the thermal conductivity.

This equation is considered here to be in a dimensionless form. The problems are characterized by their source terms, boundary conditions and anisotropic thermal conductivity field. The heat transfer equation is discretized using the control-volume technique.

One-dimensional Test Problem. The domain is a square with side length one, there are no heat sources, the two horizontal sides (y = 0, 1) are insulated, the two vertical sides have prescribed temperature levels, T = 0 at x = 0 and T = 1 at x = 1 and $k_x = k_y = 1$.

Test Problem 1. The domain is also a square with side length one but completely insulated. There are point heat sources located at (0.1, 0.1), (0.1, 0.9), (0.767, 0.133), (0.467, 0.5) and (0.9, 0.9) with strengths 1.0, 0.5, 0.6, -1.83 and -0.27, respectively. Besides, $k_x = k_y = 1$.

Test Problem 2. It is basically equal to Test Problem 1, but with $k_y = 0.01$, $k_x = 1$.

Test Problem 3. It is similar to Test Problem 1, but with a different thermal conductivity field given as: $k_x = k_y = 1$, except in the following regions: $0.467 < x < 1$ and $0 < y < 0.533$, where $k_y = 100$, $k_x = 1$; $0.167 < x < 0.4$ and $0.167 < y < 0.4$, where $k_y = 1$, $k_x = 100$ and $0.4 < x < 0.633$ and $0.7 < y < 0.933$, where $k_x = k_y = 10^{-6}$ (being practically a barrier for heat flow).

Test Problem 4. The domain is $0 < x < 2$, $0 < y < 1$. The two vertical sides at x = 0, 2 are insulated. The side at y = 0 is insulated for $1 < x < 2$ and receives a uniform heat flux $q_y = 1$ for $0 < x < 1$. The upper boundary at y = 1 is subjected to a boundary condition of the third kind, with a convective heat transfer coefficient h = 5, loosing heat to an ambient at zero temperature. Besides, $k_x = k_y = 1$.

All these test problems have been solved in a fixed mesh with 31 x 31 control volumes (similar to the one used by Stone (1968)) and for initial guesses of zero for all problem variables. Since all these problems are linear, the coefficient matrix of the discretized system of equations is calculated only once.

ASYMPTOTIC CONVERGENCE RATES OF MSIP

The cornerstone of the optimization procedure is the existence of asymptotic convergence rates for the MSI procedure and the ability of their estimation during the problem solution. A numerical study of the convergence rates of all test problems has been carried out in order to determine their behavior. The convergence rate characteristics of all test problems have proven to be very similar and only the results for the test problem 1 are shown in Fig. 1. Figure 1a shows the norm of the residual vector

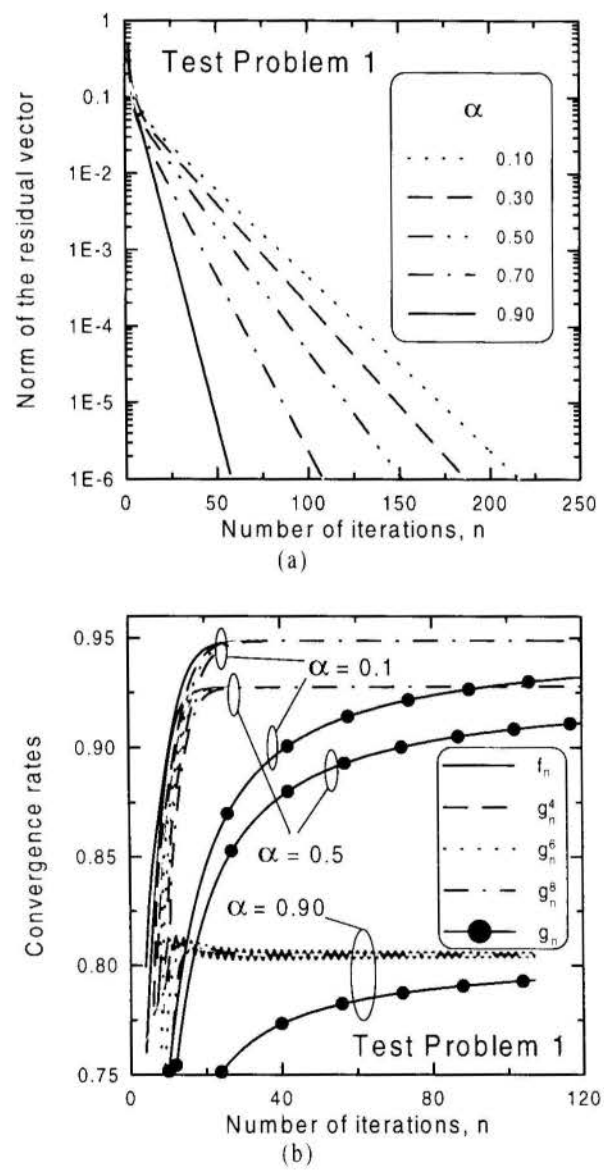


Figure 1 - Asymptotic convergence rate of the MSI procedure: (a) norm of residual vector during iteration, (b) behavior of several convergence rates during iteration

during the iterative solution of the problem using the MSIP for several values of the iteration parameter. It can be seen that the convergence rate of the residual norm achieves an asymptotic rate very quickly, usually within 20-30 iterations, where the residual norm is still in the range 10^{-1}-10^{-2}. Figure 1b shows the convergence rates f_n, g_n and g_n^N, with N = 4, 6 and 8, for three values of α. It is clear that the sequence of arithmetic means reaches the asymptotic convergence rate much slower than the original series. Although it may sometimes present an oscillatory behavior, the sequence of f_n reaches the asymptotic rate for each α value in Fig. 1b in less than 20 iterations. The sequence of g_n^N, for each value of N, also reaches the asymptotic rate quickly (20-30 iterations) with no oscillatory behavior. Since the asymptotic rate of convergence has to be estimated quickly, a sequence of smoothed f_n values (g_n^N) was chosen for its estimation, as described previously.

The proposed procedure for the estimation of the asymptotic convergence rate has to be verified. Figure 2 shows the asymptotic convergence rate, $F(\alpha)$, as obtained by the MSIP simulations for test problem 1. This figure also shows the estimated values of $F(\alpha)$ using Eq. (6) with N = 4, 6 and 8, for the optimized MSIP (OMSIP) run for test problems 1 with an initial α value of 0.10. The predictions of $F(\alpha)$ are fairly good, except near the point of minimum, where the estimated asymptotic convergence rate is usually smaller than $F(\alpha)$. This error, however, do not affect appreciably the optimization of α, because the point of minimum of $F(\alpha)$ is estimated with a small error. Besides, as we shall see later, the sequence of different α values during an OMSIP run may lead to a faster convergence than the MSIP run with the best α value. Similar results have been obtained for the other test problems. From Fig. 2, it is clear that there is no difference among the $F(\alpha)$ predictions for the three values of N for this problem. Since a small N value implies a larger number of α values, and thus LU decompositions, during the OMSIP run, the choice of the N value is then a compromise between the need of estimated $F(\alpha)$ values to perform the optimization and the overhead necessary for the extra LU decompositions.

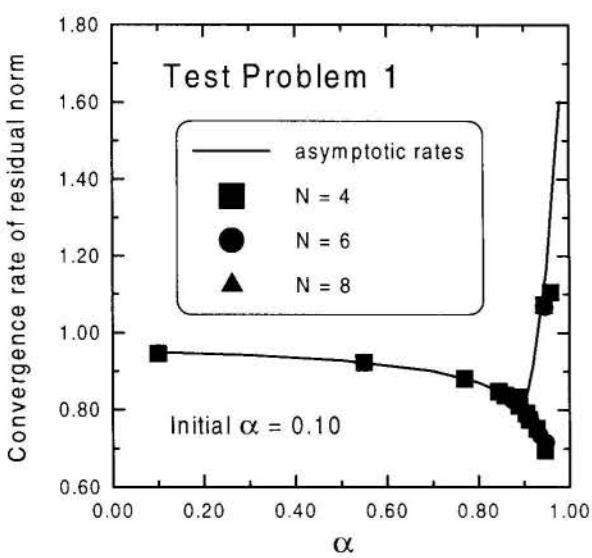


Figure 2 - Comparison between asymptotic convergence rate and its estimated value by the proposed algorithm for test problem 1.

APPLICATION OF THE OPTIMIZED MSIP

The optimized MSI procedure (OMSIP) has been applied for the five test problems described previously, using different initial values of α and for N = 4, 6 and 8. It should be noted that the particular choice of initial guesses for the variables does not affect the procedure appreciably because when the first estimation of $F(\alpha)$ is made, the norm of the residual vector has already reached a reasonably small value (around 10^{-2}), that is, the problem variables are partially converged.

Figure 3 shows the convergence characteristics of the MSI and OMSI procedures applied to test problem 1. These results are typical for all the cases analyzed. Figure 3a shows the reduction of the residual vector norm during problem solution for N = 4 and for initial α = 0.10, 0.50 and 0.90. The value of α remains constant during the iterations for the MSI procedure. For this problem, the minimum value of $F(\alpha)$ is for α = 0.90. The abscissa is the number of iterations, that is the number of times the system

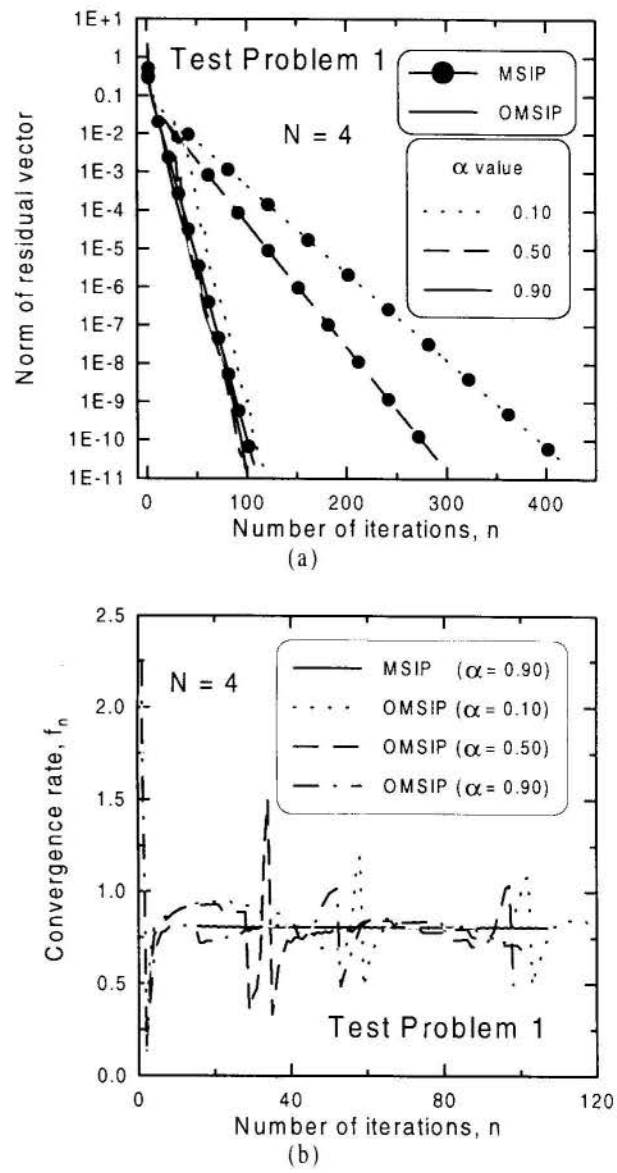


Figure 3 - Comparison between the MSIP and the OMSIP for test problem 1: (a) norm of residual vector during iteration, (b) convergence rate during iteration.

given by Eq. (3) has been solved. From this figure, it is clear that the OMSI procedure dramatically increases the convergence rate when the iteration parameter is far from its optimum value. For all initial α values, the convergence rate of the OMSIP tends quickly to the asymptotic convergence rate of the MSI procedure with its optimum α value (0.90, in this case). For the worst case ($\alpha = 0.10$), the OMSI procedure reaches a convergence rate close to the optimum asymptotic convergence rate of the MSIP for a residual vector norm value of 10^{-3}. It should be noted that the OMSI procedure can achieve a given convergence in a smaller number of iterations than the MSI procedure with its optimum α value. This is shown in Fig. 3a for the solution with initial $\alpha = 0.50$, when the residual norm is below 10^{-4}, and for the solution with initial $\alpha = 0.90$, when the residual norm is below 10^{-2}. Figure 3b shows the convergence rates for the solution of test problem 1 using the OMSIP for the same cases presented in Fig. 3a. The convergence rate behavior of the MSIP for the best α value (0.90) is also shown in Fig. 3b. It can be seen that the OMSI procedure keeps the convergence rate close to the optimum asymptotic rate of the MSIP, even though it cannot reach exactly this asymptotic rate due to its adaptive characteristics and the errors in the $F(\alpha)$ prediction.

The convergence of the OMSIP in fewer iterations, as shown in Fig. 3a for the test problem 1, is not uncommon, as can be seen from Table 1, where the number of iterations for a given tolerance in the residual norm is presented for the two solution procedures for different α values and for all test problems. For all test problems but test problem 2, and for all N values used in the present analysis, the OMSI procedure with its best α value converges in fewer iterations than the MSI procedure using its best α value. This is not true for test problem 2 because its point of minimum of $F(\alpha)$ in the $[\alpha^0,\alpha^1]$ interval is the chosen α^1 value (0.99). Actually, the minimum of $F(\alpha)$ is somewhere inside the interval (0.99,1], which makes the adaptive optimization worse. However, this minimum is quite sharp which makes the OMSIP better than the MSIP for any α value below 0.98 (see Table 1).

Table 1 - Comparison of solution methods in terms of the number of iterations.

α	MSIP	OMSIP		
		N = 4	N = 6	N = 8
1-D test problem (tolerance of the residual norm = 10^{-12})				
0.10	500	119	121	126
0.50	347	110	116	121
0.89	113	**94**[a]	97	101
0.90	**105**[a]	96	**97**[a]	101
0.91	119	97	97	**99**[a]
Test problem 1 (tolerance of the residual norm = 2.1×10^{-12})				
0.10	417	118	120	127
0.50	292	98	110	118
0.80	160	99	**96**[a]	102
0.85	131	**96**[a]	100	105
0.90	**107**[a]	100	104	107
0.91	149	103	100	**101**[a]
Test problem 2 (tolerance of the residual norm = 2.1×10^{-10})				
0.10	2278	264	251	319
0.50	1904	262	250	271
0.90	852	247	253	265
0.98	291	219	221	225
0.99	**180**[a]	**201**[a]	**203**[a]	**205**[a]
Test problem 3 (tolerance of the residual norm = 2.1×10^{-10})				
0.10	471	158	168	168
0.50	338	199	148	156
0.87	**146**[a]	**132**[a]	132	139
0.90	diverge	137	**131**[a]	**136**[a]
Test problem 4 (tolerance of the residual norm = 10^{-12})				
0.10	724	140	149	147
0.50	518	132	140	148
0.90	172	121	128	130
0.92	146	121	**125**[a]	**117**[a]
0.93	**132**[a]	117	126	128
0.94	154	**116**[a]	**125**[a]	128

[a] smallest number of iterations in the corresponding method

Since the extra LU decompositions of the modified matrix have some computational cost, it is not quite fair to compare the MSIP to the OMSIP by the number of iterations needed to achieve a given convergence. Therefore, the computer time spent by each method to solve each one of the test problems for a given accuracy must be compared. The I/O operations used to monitor the intermediate results are eliminated to avoid any effect in the actual computation time needed for each calculation. All the results shown above have been obtained by using strict convergence criteria for the residual norm. Although this is desirable to fully test the optimization procedure, it is unrealistic for the usual solution of field problems. Therefore, a series of calculations using the MSI and the OMSI procedures are also made for all test problems using the following convergence criterion for every point in the field

$$\frac{\left|T^{(n)} - T^{(n-1)}\right|}{\varepsilon_r \left|T^{(n)}\right| + \varepsilon_a} < 1 \qquad (9)$$

where the relative and absolute tolerances are $\varepsilon_r = 10^{-4}$ and $\varepsilon_a = 10^{-6}$, respectively.

Figures 4 shows the relative time necessary to satisfy the prescribed convergence criterion as a function of α, for test problem 1. The results for the other test problems are similar to those for the test problem 1 and are not shown. The relative time is the computational time for a given case divided by the computational time spent by the MSIP, using its best α value, to solve the same problem. Results for both convergence criteria, that is the strict tolerance in the residual norm and that given by

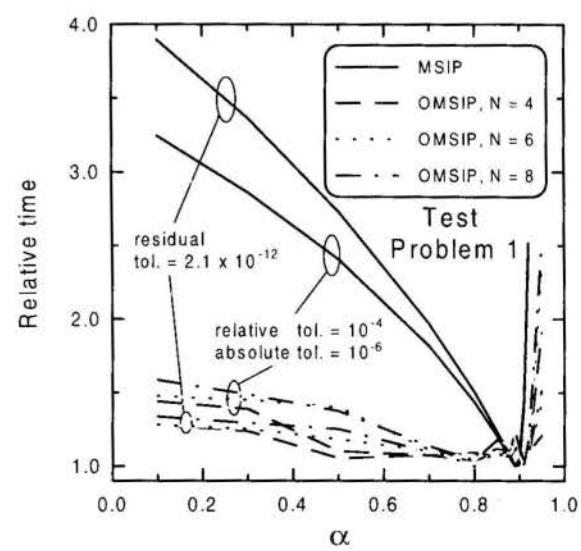


Figure 4 - Comparison between the MSIP and the OMSIP. Relative time spent in computations for the test problem 1.

Eq. (9), are shown. From this figure, it is clear that, in general, the OMSIP is faster than the MSIP for all range of α values but those very close to the minimum point. It can also be seen that the OMSIP is quite insensitive to the initial α value used to start the algorithm. Nevertheless, the OMSIP has an optimum value for the initial α which sometimes gives a smaller calculation time than the MSI procedure with its best α value (which occurred for test problem 4). Finally, the results for all test problems show that the computational time spent by the OMSIP to solve a given problem do not depend much on the value of N used in Eqs. (6) and (7). Small values of N are slightly better for simple problems (one-dimensional test problem, test problems 1 and 4) while more difficult problems seem to behave better with larger N values (test problems 2 and 3).

A comparison can be made between the computational time needed to solve each one of the test problems using the MSIP and the OMSIP with their best α values. Of course, we should not expect that the OMSIP performs better than the MSIP because of the existing overhead of the optimizing algorithm. Although there are some cases where the OMSIP is really faster than the MSIP, the difference in computational time is small, being around 10% (test problem 4). In general, the OMSIP is 5-10% slower than the MSIP when both procedures are started with their best values of α. For test problem 2, which has a sharp maximum for $F(\alpha)$ outside the search interval, the OMSIP is 20-30% slower than the MSIP. However, it is not fair to compare these algorithms at their best α values for a given convergence criterion, because the trial-and-error procedure of finding the best value of the iteration parameter is exactly what the OMSIP is trying to avoid. Therefore, one should use a fixed initial value of the iteration parameter to compare the relative performance of the algorithms. Thus, $\alpha = 0.5$ is chosen, as used by some implementations of the MSIP (Güçeri, 1991), to compare the MSI procedure to the OMSI procedure. Table 2 shows the relative computation time (time spent by the OMSIP over time spent by the MSIP) for all the cases analyzed. It can be seen that the OMSIP is faster than the MSIP by a factor of 1.47 to 7.09 for those cases. In general, the OMSIP is about twice faster than the MSIP.

CONCLUSIONS

This paper numerically demonstrates the existence of asymptotic rates of convergence of the residual norm of a system of equations when it is solved by the MSI procedure, developing an algorithm to their estimation. Based on the predictions of the asymptotic rates of convergence, an algorithm for the adaptive optimization of the iteration parameter is developed to improve the MSIP performance during problem solution. This eliminates the trial-and-error procedure usually necessary to determine the optimum value of the iteration parameter. Five heat transfer problems are solved by the optimized MSIP, called the OMSIP, to verify its performance. From the results shown above, the following conclusions can be drawn.

- The OMSI procedure is about 5-10% slower than the MSIP when both are used with their best values for the iteration parameter. That is, even if one choose the best values for both procedures, the time spent by the optimization algorithm and extra LU decompositions is almost completely compensated by the reduction in the number of iterations necessary to achieve convergence.
- The performance of the OMSI procedure is only slightly dependent on the value of the iteration parameter used to start the algorithm and on the value of N used in the smoothing process necessary to estimate the asymptotic rate of convergence.
- For a fixed value of 0.5 for the iteration parameter, the OMSI procedure is 47 to 700% faster than the MSI procedure in the cases analyzed. In the mean, the OMSIP is about twice faster than the MSIP.

Furthermore, the adaptive characteristic of the optimization algorithm of the OMSIP allows its usage in non-linear or time-dependent field problems that require iterative solution of linearized systems of equations. It is believed that the OMSI procedure using the idea of optimization of the iteration parameter during problem solution is a significant contribution to the state of the art of field problem solution.

Table 2 - Comparison of computation times of the MSIP and the OMSIP with $\alpha = 0.50$

Time ratio	Convergence of the residual norm[a]			Convergence given by Eq. (9)		
OMSIP / MSIP	N = 4	N = 6	N = 8	N = 4	N = 6	N = 8
1-D	0.377	0.390	0.398	0.542	0.585	0.609
1	0.385	0.432	0.457	0.457	0.581	0.571
2	0.150	0.141	0.155	0.220	0.178	0.219
3	0.679	0.490	0.513	0.669	0.634	0.642
4	0.284	0.299	0.306	0.417	0.406	0.421

[a] see Table 1 for residual norm tolerances used in each test problem.

ACKNOWLEDGMENTS

The author would like to acknowledge the financial support from CNPq, Grant No. 523777/94-9.

REFERENCES

Aziz, K. and Settari, A., 1979, "Petroleum Reservoir Simulation", 1st ed., chap. 8, Elsevier, New York.

Güçeri, S. I., 1991, "Finite Difference Solution of Field Problems", in C. L. Tucker III (ed.), *Fundamentals of Computer Modeling for Polymer Processing*, chap. 5, Hanser Publishers, Munich.

Peaceman, D. W. and Rachford, H. H., , 1955, "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations", *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, Vol. 3, pp. 28-41.

Schneider, G. E. and Zedan, M., 1981, "A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 4, pp. 1-19.

Stone, H. L., 1968, "Iterative Solution of Implicit Approximation of Multidimensional Partial Differential Equations", *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 5, pp. 530-558.

ABCM

SIMPLE, SOLA E VORTICIDADE-FUNÇÃO CORRENTE: UM TESTE COMPARATIVO

Admilson Teixeira Franco [1]
Ricardo Alan Verdú Ramos [2]
Marcelo Moreira Ganzarolli [3]
[1] CEFET-PR/DAMEC/NUPES -- 80230-901 -- Curitiba-PR -- Brasil
[2] UNESP/FEIS/DEM -- 15385-000 -- Ilha Solteira-SP -- Brasil
[3] UNICAMP/FEM/DE -- 13081-970 -- Campinas-SP -- Brasil

RESUMO

Neste trabalho são comparados três métodos para o acoplamento pressão-velocidade amplamente utilizados na solução das equações de Navier-Stokes, a saber, SIMPLE, SOLA e Vorticidade Função-Corrente, os quais foram empregados na solução de dois problemas clássicos: a cavidade hidrodinâmica e a cavidade aquecida lateralmente. Os perfis dos componentes da velocidade e outros parâmetros característicos relevantes são comparados com soluções de referência da literatura. Como resultado é possível determinar qual o método que melhor se aplica em cada caso estudado.

INTRODUÇÃO

Este trabalho compara o desempenho de três métodos para o acoplamento pressão-velocidade, comumente utilizados na solução de problemas de escoamento de fluidos e transferência de calor, os quais são: SIMPLE, SOLA e Vorticidade-Função Corrente (VFC).

A avaliação dos métodos é feita resolvendo-se dois problemas clássicos: a cavidade hidrodinâmica e a cavidade térmica. A solução do problema da cavidade hidrodinâmica usada como referência foi feita por Ghia et al. (1982), que utilizou a formulação da Vorticidade-Função Corrente e o método de multi-grid, obtendo refinadas soluções para altos valores de Re no interior da cavidade. A cavidade hidrodinâmica é mostrada na Figura 1.

A solução da cavidade térmica com as paredes verticais submetidas a diferentes temperaturas e as horizontais adiabáticas foi feita por G. de Vahl Davis (1983), utilizando a formulação da Vorticidade-Função Corrente, obtendo soluções para os números de Ra = 10^4, 10^5 e 10^6. A cavidade térmica é mostrada na Figura 2.

Os métodos de acoplamento pressão-velocidade comparados neste trabalho foram escolhidos devido as peculiaridades inerentes a cada um. O método SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation), popularizado por Patankar (1980), é amplamente utilizado, apresentando resultados satisfatórios. O método SOLA descrito por Hirt et al. (1975), é baseado num aprimoramento do procedimento transiente de Harlow e Welsh (1965). O método da Vorticidade-Função Corrente (VFC) é atrativo para escoamentos bidimensionais, simplificando o sistema de equações a ser resolvido.

Os resultados obtidos para a cavidade hidrodinâmica foram para Re = 400, 1000 e 3200. Para a cavidade térmica os resultados foram para Ra = 10^4, 10^5 e 10^6, com o número de Prandtl fixo em 0.71.

O desempenho de cada método é testado para cada situação, podendo-se através de uma análise decidir qual a melhor opção.

EQUAÇÕES DE TRANSPORTE

Para a solução dos problemas descritos, são feitas as hipóteses de escoamento incompressível, fluido newtoniano, propriedades físicas constantes, escoamento laminar e bidimensional. Para os métodos SIMPLE e VFC, também é feita a hipótese de escoamento permanente. Desse modo, as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e energia na forma adimensional podem ser escritas em variáveis primitivas como:

$$\frac{\partial U}{\partial X}+\frac{\partial V}{\partial Y}=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial U}{\partial \tau}+U\frac{\partial U}{\partial X}+V\frac{\partial U}{\partial Y}=-\frac{\partial P}{\partial X}+C_{dh}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}+\frac{\partial^2 U}{\partial Y^2}\right) \tag{2}$$

$$\frac{\partial V}{\partial \tau}+U\frac{\partial V}{\partial X}+V\frac{\partial V}{\partial Y}=-\frac{\partial P}{\partial Y}+C_{dh}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2}+\frac{\partial^2 V}{\partial Y^2}\right)+S_\theta \tag{3}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau}+U\frac{\partial \theta}{\partial X}+V\frac{\partial \theta}{\partial Y}=C_{dt}\left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial X^2}+\frac{\partial^2 \theta}{\partial Y^2}\right) \tag{4}$$

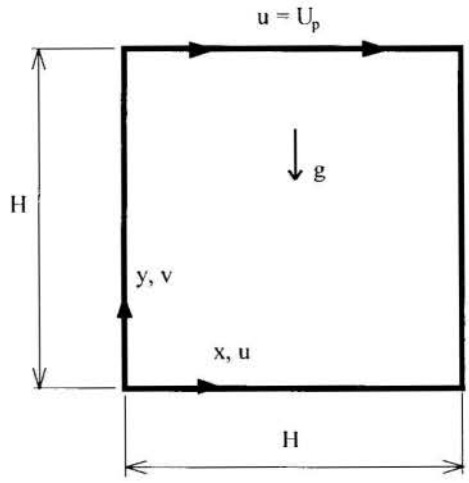


Figura 1: Geometria da cavidade hidrodinâmica.

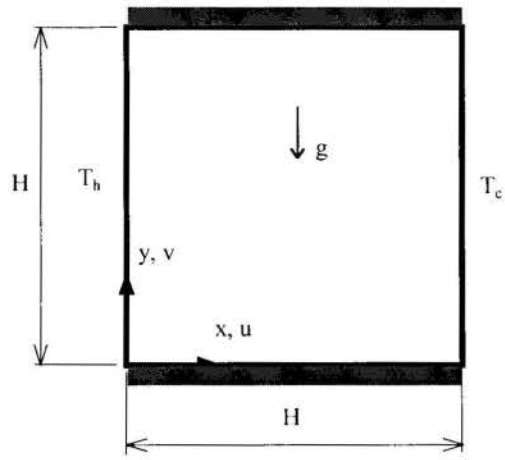


Figura 2: Geometria da cavidade térmica.

As variáveis adimensionais mostradas na tabela abaixo, para a cavidade hidrodinâmica são dadas por White (1991) e para a cavidade térmica por Lage e Bejan (1991).

Tabela 1: Variáveis adimensionais

Variáveis adimensionais	Cavidade Hidrodinâmica	Cavidade Térmica
(X,Y)	(x,y)/H	(x,y)/H
(U,V)	$(u,v)/U_p$	$(u,v)/(\alpha/H)(RaPr)^{1/2}$
τ	$U_p t/H$	$\alpha(RaPr)^{1/2} t/H^2$
P	$p/\rho U_p^2$	$(H^2/\rho\alpha^2)[(p+\rho gy)/(RaPr)]$
θ	------	$(T - (T_h + T_c)/2)/ (T_h - T_c)$
C_{dh}	1/Re	$(Pr/Ra)^{1/2}$
C_{dt}	------	$1/(RaPr)^{1/2}$
S_θ	------	θ

Condições de Contorno. Na forma adimensional, podem ser expressas da seguinte forma para a cavidade térmica:

$$Y = 0 \Rightarrow U = V = 0 \quad e \quad \frac{\partial\theta}{\partial Y} = 0 \tag{5}$$

$$Y = 1 \Rightarrow U = V = 0 \quad e \quad \frac{\partial\theta}{\partial Y} = 0 \tag{6}$$

$$X = 0 \Rightarrow U = V = 0 \quad e \quad \theta = -0.5 \tag{7}$$

$$X = 1 \Rightarrow U = V = 0 \quad e \quad \theta = +0.5 \tag{8}$$

Para a cavidade hidrodinâmica, o valor da condição de contorno do componente horizontal da velocidade para Y=1 é $U=U_p$.

Para o método da VFC, as equações são:

$$U\frac{\partial\zeta}{\partial X} + V\frac{\partial\zeta}{\partial Y} = C_{dh}\left(\frac{\partial^2\zeta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\zeta}{\partial Y^2}\right) + \frac{\partial\theta}{\partial X} \tag{9}$$

$$\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial Y^2}\right) = -\zeta \tag{10}$$

As condições de contorno para a cavidade hidrodinâmica em Y=1 são:

$$Y = 1 \Rightarrow \frac{\partial\psi}{\partial Y} = 1 \quad e \quad \zeta = (-8\psi_{i,m-1} + \psi_{i,m-2} - 6\Delta y) / 2\Delta y^2 \tag{11}$$

Os grupos adimensionais $Re=U_pH/\nu$, $Ra=g\beta H^3(T_h - T_c)/\alpha\nu$ e $Pr=\nu/\alpha$ representam os números de Reynolds, Rayleigh e Prandtl, respectivamente.

SOLUÇÃO NUMÉRICA

Método. As equações são discretizadas pelo método dos volumes de controle finitos e resolvidas numericamente utilizando-se os três algoritmos mencionados: SIMPLE, SOLA e VFC. A discretização numérica dos termos convectivos foi feita utilizando-se o esquema exponencial, largamente difundido por Patankar (1980) na forma do esquema "power-law". Os termos difusivos são calculados com o esquema central.

Os métodos utilizados neste trabalho são descritos brevemente a seguir.

SIMPLE: das equações do movimento (2) e (3) são obtidas as equações para a correção dos componentes da velocidade. O processo inicia-se estimando-se os valores iniciais para a velocidade e pressão. Resolve-se em seguida a equação da quantidade de movimento e obtem-se o fator de correção da pressão, que satisfaz a equação da continuidade (1). A nova pressão é obtida somando-se o valor inicial com o fator de correção, este último normalmente sub-relaxado. O processo é repetido até satisfazer o critério de convergência.

SOLA: consiste basicamente em extrair os fluxos de massa das equações da quantidade de movimento (2) e (3) e transportá-los para a equação da continuidade (1), obtendo-se uma equação para a pressão. A matriz de rigidez gerada é de banda, simétrica e definida positiva, podendo, portanto, ser decomposta pelo método direto de Cholesky (Golub e Loan, 1985), o que é feito uma única vez antes do início do processo iterativo. Após isso é feito o avanço no tempo (nível $n+1$) da pressão e velocidade a partir de prévios valores da velocidade (nível n), até atingir o regime permanente.

VFC: obtém-se a equação de transporte da vorticidade (9) eliminando-se a pressão das equações (2) e (3) e subtraindo-as. A equação (10) é obtida substituindo-se a definição de função corrente na equação da vorticidade. São admitidos valores iniciais para a vorticidade e o processo iterativo começa obtendo-se a função corrente a partir da equação (10). O campo de velocidade e a vorticidade na parede são calculados. A equação da energia (4) é resolvida e posteriormente a equação da vorticidade (9). Retorna-se ao primeiro passo agora com o valor do campo de vorticidade. O processo iterativo continua até que os valores das variáveis comecem a se repetir, dentro de determinado critério, ao fim de cada iteração.

Malha. Foram utilizadas na comparação malhas regulares 20×20, 40×40 e 80×80.

Desvio percentual $\xi(\%)$. É calculado da seguinte maneira:

$$\xi(\%) = \left|\frac{\phi_{ref} - \phi_{calc}}{\phi_{ref}}\right| 100 \tag{12}$$

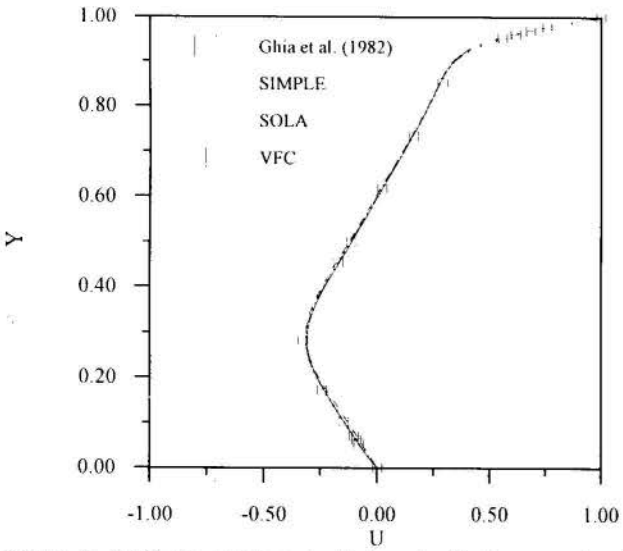


Figura 3: Perfil do componente U da velocidade no centro da cavidade para Re = 400.

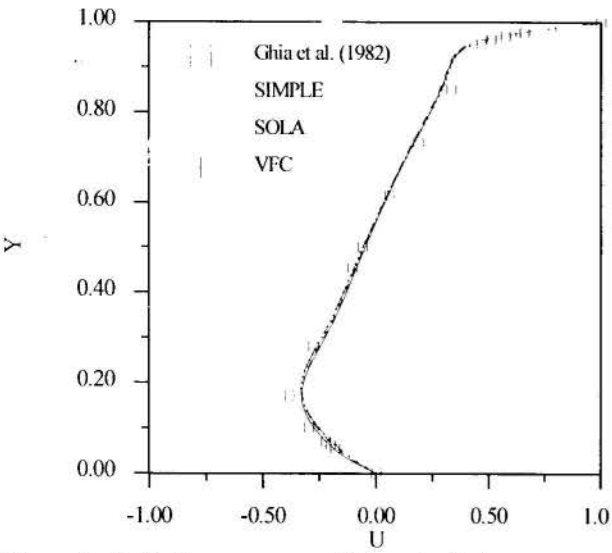


Figura 4: Perfil do componente U da velocidade no centro da cavidade para Re = 1000.

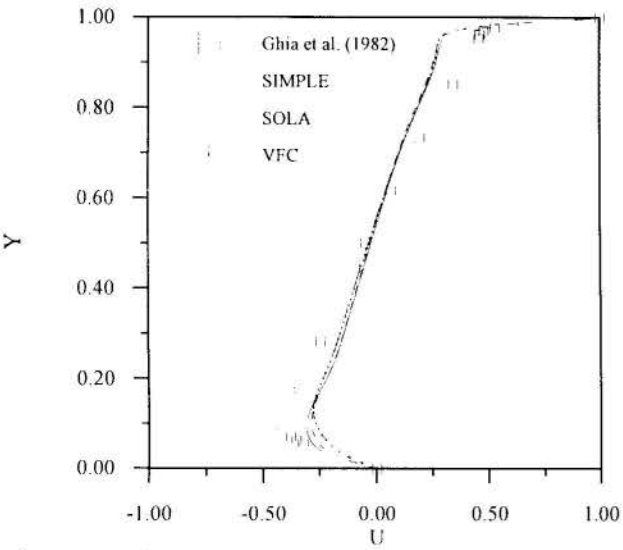


Figura 5: Perfil do componente U da velocidade no centro da cavidade para Re = 3200.

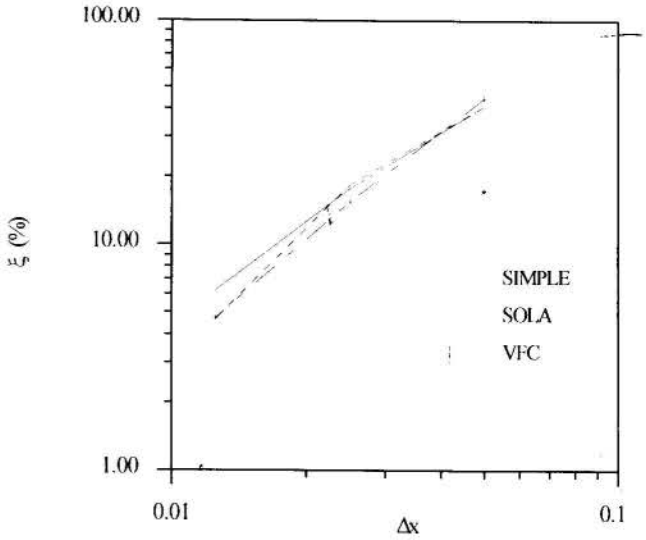


Figura 6: Evolução do desvio percentual de U com o refinamento da malha para Re = 400.

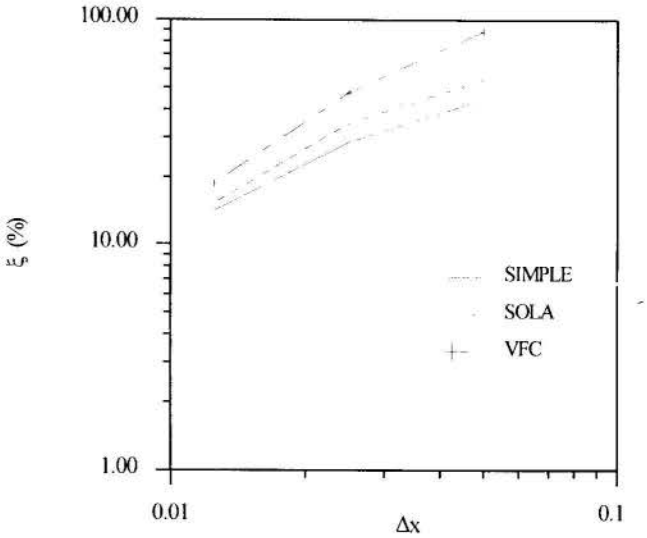


Figura 7: Evolução do desvio percentual de U com o refinamento da malha para Re = 1000.

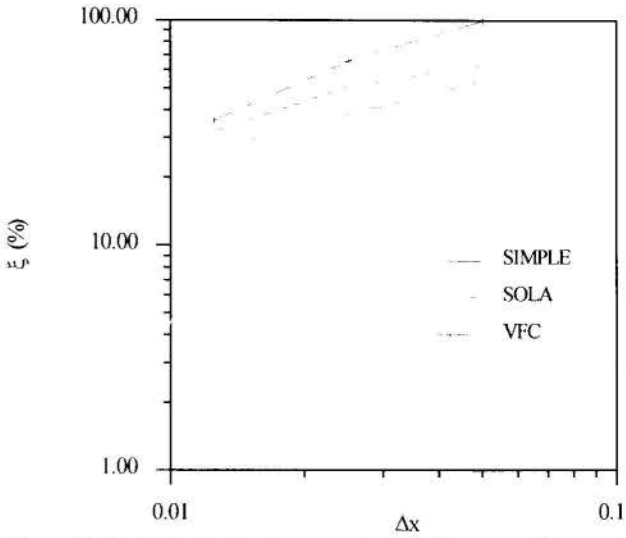


Figura 8: Evolução do desvio percentual de U com o refinamento da malha para Re = 3200.

Convergência. Foi adotado como critério de convergência do processo iterativo a seguinte condição:

$$\max\left|\frac{\phi^{n+1}-\phi^{n}}{\phi^{n}}\right| \leq 10^{-4} \qquad (13)$$

onde ϕ= u, v ou T

Nusselt médio. Determinado através do acoplamento das equações de condução-convecção na parede vertical esquerda, resultando:

$$\overline{Nu} = -\int_{0}^{1}\frac{\partial\theta}{\partial X}dY \qquad (14)$$

Estabilidade Numérica. No método SOLA é garantida pela limitação do passo de tempo Δt (Villand, 1986, Jaluria e Torrance, 1986)

RESULTADOS

Cavidade hidrodinâmica

Os resultados obtidos para o problema da cavidade hidrodinâmica foram para Re = 400, 1000 e 3200.

O componente U da velocidade utilizada nos cálculos é tomada na linha vertical que passa através do centro geométrico da cavidade. O desvio percentual é calculado no ponto de máxima velocidade no fluxo reverso, local onde as variações com o refinamento são mais destacadas.

Nas Figuras 3, 4 e 5 são mostrados os perfis do componente U da velocidade para os valores de Re = 400, 1000 e 3200, respectivamente. Os resultados são comparados com valores do perfil fornecidos por Ghia et al. (1982), que utiliza uma malha regular 129×129 e diferenças finitas para a discretização das equações. Na Figura 3, que expressa um valor relativamente baixo do número de Re, os três métodos são coincidentes. Na Figura 4, os perfis resultantes também são praticamente coincidentes. Na Figura 5, a diferença mais significativa ocorre na parte inferior da cavidade, onde o método SIMPLE demonstra melhor aproximação com relação ao perfil de referência.

Os gráficos mostrados nas Figuras 6, 7 e 8 são interessantes no sentido de caracterizar a relação entre o decaimento do desvio percentual e o refinamento da malha.

Na Figura 6, os resultados do método SOLA e VFC são muito próximos, sendo que a inclinação da curva é menor para o método SIMPLE. Na Figura 7, o melhor resultado é o obtido pelo SIMPLE, seguido pelo SOLA. Na Figura 8, ocorre o mesmo comportamento descrito para a Figura 7.

Para todos os casos estudados, o método que apresenta a melhor performance em termos do decaimento do desvio percentual com o refinamento da malha é o método SIMPLE, seguido pelo SOLA e finalmente o VFC, sendo que a diferença mais significativa ocorre para Re = 3200.

Cavidade térmica

Os resultados para a cavidade térmica com um gradiente horizontal de temperatura e paredes horizontais adiabáticas foram obtidos para Ra = 10^4, 10^5 e 10^6. A solução utilizada como referência foi a de G. de Vahl Davis (1983), que utilizou o método das diferenças finitas, malha regular 80×80 e extrapolação de Richardson para tornar os resultados independentes da malha. Os resultados mostrados abaixo são para malha 80×80.

Nas Tabelas 2, 3 e 4 são mostrados os resultados para Ra = 10^4, 10^5 e 10^6, respectivamente. Cinco parâmetros característicos relevantes do problema foram escolhidos com o objetivo de comparação, a saber, U_{max}, V_{max}, $\overline{Nu}$, Nu_{max} e $|\psi_{max}|$. Nas tabelas 2, 3 e 4 eles são mostrados para Ra = 10^4, 10^5 e 10^6, respectivamente. É possível observar a comparação qualitativa entre as soluções obtidas com os três métodos e a referência.

Tabela 2: Parâmetros característicos obtidos para Ra =10^4.

Parâmetros característicos	SIMPLE	SOLA	VFC	G. de Vahl Davis (1983)
U_{max}	15.85	17.13	16.16	16.178
V_{max}	19.03	20.53	19.55	19.617
$\overline{Nu}$	2.155	2.290	2.244	2.238
Nu_{max}	3.328	3.572	3.535	3.528
$\lvert\psi_{max}\rvert$	4.919	5.329	5.073	5.071

Tabela 3: Parâmetros característicos obtidos para Ra = 10^5.

Parâmetros característicos	SIMPLE	SOLA	VFC	G. de Vahl Davis (1983)
U_{max}	33.64	35.25	34.66	34.73
V_{max}	65.45	68.54	67.98	68.59
$\overline{Nu}$	4.197	4.539	4.521	4.509
Nu_{max}	6.823	7.840	7.767	7.717
$\lvert\psi_{max}\rvert$	9.244	9.637	9.625	9.612

Tabela 4: Parâmetros característicos obtidos para Ra = 10^6.

Parâmetros característicos	SIMPLE	SOLA	VFC	G. de Vahl Davis (1983)
U_{max}	60.63	65.60	64.70	64.63
V_{max}	202.87	218.36	216.02	219.63
$\overline{Nu}$	7.711	8.975	8.836	8.817
Nu_{max}	13.501	18.737	18.221	17.925
$\lvert\psi_{max}\rvert$	15.678	16.969	16.894	16.750

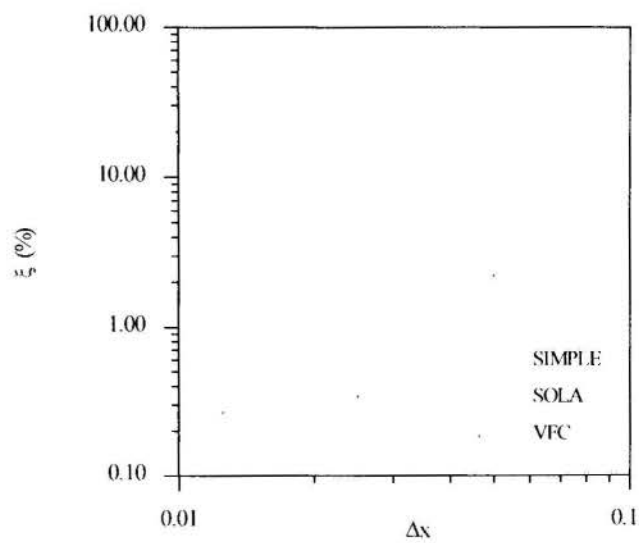


Figura 9: Desvio percentual de $\overline{Nu}$ com o refinamento da malha para Ra = 10^5.

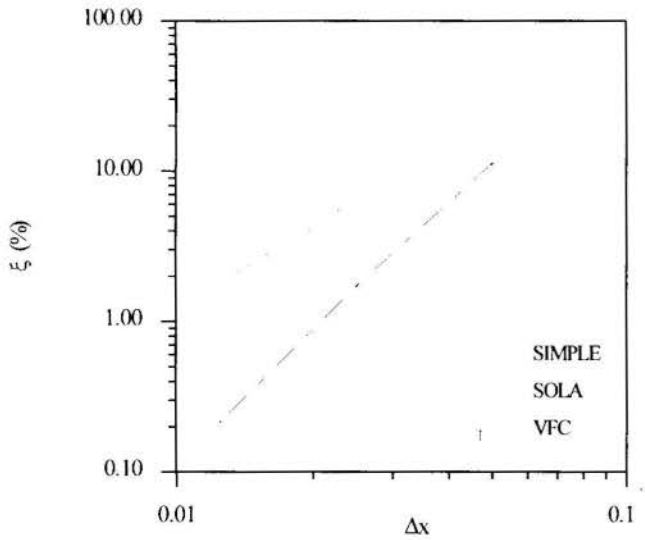


Figura 10: Desvio percentual de $\overline{Nu}$ com o refinamento da malha para Ra = 10^6.

Nas Figuras 9 e 10, são mostrados os gráficos da evolução do desvio percentual de $\overline{Nu}$ com o refinamento para Ra = 10^5 e 10^6, respectivamente. Observa-se que o método SIMPLE é o que apresenta a menor inclinação da curva, sendo do método VFC os melhores resultados.

A evolução do desvio percentual de $|\psi_{max}|$ com o refinamento para Ra = 10^5 e 10^6 é mostrado nas Figuras 11 e 12, respectivamente. Novamente o método SIMPLE é o que mais se afasta, contudo, apresenta sempre a tendência monotônica para o valor de referência. Os resultados dos métodos VFC e SOLA são próximos, com vantagem do VFC para malhas refinadas.

As soluções obtidas pelo método VFC são as que mais se aproximam da solução de referência. Em geral, as soluções obtidas pelo métodos SIMPLE e SOLA, são ligeiramente inferiores e superiores, respectivamente, sendo que o método SIMPLE é o que mais se distância.

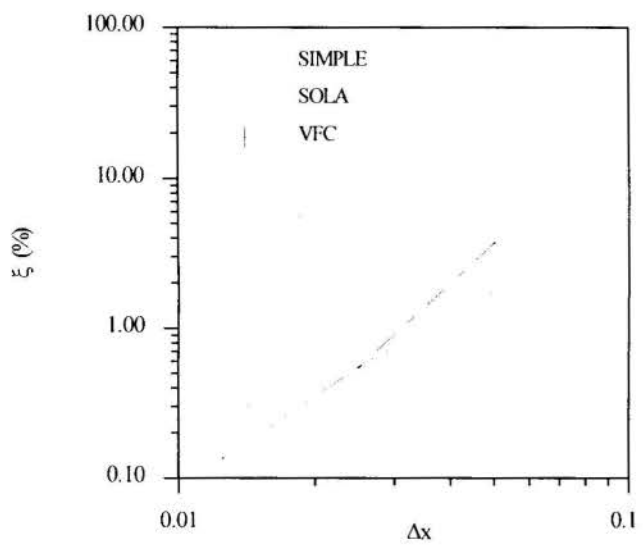


Figura 11: Evolução do desvio percentual de $|\psi_{max}|$ com o refinamento da malha para Ra = 10^5.

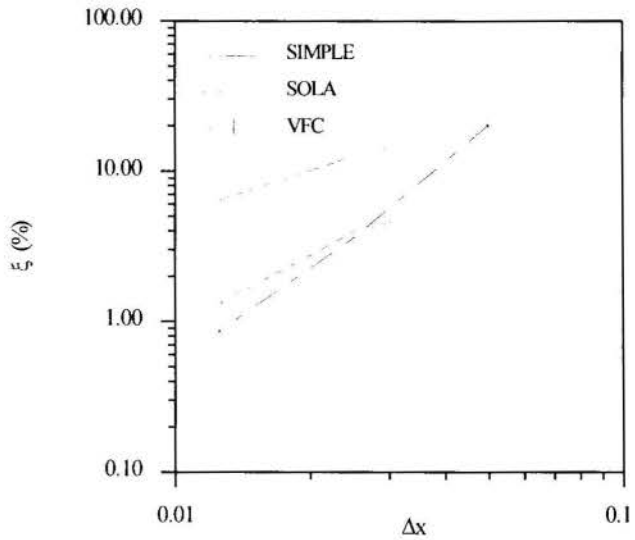


Figura 12: Evolução do desvio percentual de $|\psi_{max}|$ com o refinamento da malha para Ra = 10^6.

No entanto, para Ra=10^6 e malhas mais refinadas, como 160×160, o erro no $\overline{Nu}$ e $|\psi_{max}|$ são, respectivamente, de 6.3 e 3.1 %, mostrando que embora mais lento que os outros dois métodos, o SIMPLE tende a convergir para a solução padrão.

COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES

No problema da cavidade hidrodinâmica todos os três métodos de acoplamento pressão-velocidade convergem monotonicamente, sendo que o menor desvio percentual, para o mesmo nível de refinamento, obtém-se com o método SIMPLE, seguido pelo SOLA e finalmente o VFC. O comportamento do método VFC deve-se em parte ao erro cometido na determinação da vorticidade na parede, que não pode ser determinada com precisão enquanto os resultados forem dependentes do refinamento da malha.

Na cavidade térmica, os resultados obtidos mostram que o método VFC é o que apresenta o melhor desempenho, seguido pelo SOLA e SIMPLE.

Os métodos apresentaram, em geral, bons resultados. O método SIMPLE, apesar de na cavidade térmica apresentar convergência mais lenta que os outros métodos, com o refinamento da malha ele tende para os valores da solução de referência.

É interessante notar que o método SOLA, para ambos os problemas, apresenta resultados satisfatórios, tendo menos sensibilidade às mudanças das condições de contorno que os métodos SIMPLE e VFC.

NOMENCLATURA

Letras Latinas

g	aceleração da gravidade [ms^{-1}]
H	altura/largura da cavidade [m]
C_{dh}	coeficiente de difusão [m^2s^{-1}]
C_{dt}	coeficiente de difusão [m^2s^{-1}]
p	pressão [Nm^{-2}]
P	pressão [adimensional]
S_θ	termo fonte [adimensional]

t	tempo [s]
T	temperatura [K]
u	componente horizontal da velocidade [ms^{-1}]
U	componente horizontal da velocidade [adimensional]
U_{max}	máxima velocidade horizontal no plano médio vertical da cavidade [adimensional]
v	componente vertical da velocidade [ms^{-1}]
V	componente vertical da velocidade [adimensional]
V_{max}	máxima velocidade vertical no plano médio horizontal da cavidade [adimensional]
x	coordenada horizontal [m]
X	coordenada horizontal [adimensional]
y	coordenada vertical [m]
Y	coordenada vertical [adimensional]

Letras gregas

Δx	espaçamento regular entre os nós da malha na direção x[m]
Δy	espaçamento regular entre os nós da malha na direção y[m]
α	difusividade térmica [m^2s^{-1}]
β	coeficiente de expansão térmica [K^{-1}]
ϕ	u, v ou T
ν	viscosidade cinemática [m^2s^{-1}]
θ	temperatura adimensional
ρ	densidade do fluido [kg m^{-3}]
τ	tempo adimensional
ψ	funcão corrente [adimensional]
ζ	vorticidade [adimensional]

Subscritos

c	frio
calc	valor calculado
h	quente
m	número de pontos na direção y
max	valor máximo
p	parede
ref	valor de referência

Superescritos

n	enésima iteração
–	valor médio

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Davis, G. de Vahl, 1983, "Natural Convection of Air in a Square Cavity: a Bench-Mark Numerical Solution", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 3, p. 249-264.

Ghia, U., Ghia, K. N. e Shin, C. T., 1982, "High-Re Solution for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equation and a Multigrid Method", *Journal of Computational Physics*, vol. 48, p. 387-411.

Golub, G. H. e Loan, C. F. V., 1985, "Matrix Computations", The Johns Hopkins University Press, 4ª edição , USA.

Harlow, F. H. e Welsh, J. E., 1965, "Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface", *Physics of Fluids*, vol. 8, nº 12, p. 2182-2185.

Hirt, C. W., Nichols, B. D. e Romero, N. C.,1975, "SOLA-Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flow", Los Alamos Laboratory, Report LA-5852.

Jaluria, Y. e Torrance, K. E., 1986, "Computational Heat Transfer", Hemisphere Publishing Corporation, USA.

Lage, J. L. e Bejan, A., 1991, "The Ra-Pr Domain of Laminar Natural Convection in an Enclosure Heated from the Sides", *Numerical Heat Transfer*, Parte A, vol. 19, p. 21-41.

Patankar, S. V.,1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere Publishing Corporation, USA.

Villand, M., 1986, "TRIO-VF - Note de Presentation de la Version Octobre 86", Centre d'Etudes Nucleaires de Grenoble, França.

White, F. M., 1991, "Viscous Fluid Flow", Mac-Graw Hill, 2ª edição.

ABSTRACT

In this work three numerical methods of pressure-velocity coupling spreadly used in the solution of the Navier-Stokes equations, namely, SIMPLE, SOLA and Vorticity-Streamfunction, are compared in the solution of two classical problems: the lid-driven cavity flow and the cavity heated from the side. The profile of the component velocity and other relevants characteristics parameters are compared with bench-mark solutions found in the literature. As results of this study is possible evaluate the performance of the methods in each situation.

ANÁLISE DE ESCOAMENTOS HIPERSÔNICOS UTILIZANDO MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS

João Luiz F. Azevedo
Divisão de Sistemas Espaciais
Instituto de Aeronáutica e Espaço
12228-904 - São José Campos- SP

Heidi Korzenowski
Divisão de Engenharia Aeronáutica
Instituto Tecnológico de Aeronáutica
12228-900-São José dos Campos- SP

RESUMO

Este trabalho preocupa-se em realizar uma avaliação crítica de três esquemas diferentes de discretização espacial para cálculo de escoamentos hipersônicos. Os campos de escoamento são simulados usando as equações de Euler 2-D, discretizadas num procedimento de volumes finitos "cell centered" em malhas não-estruturadas. Os fluxos na interface são calculados ou por um esquema de diferenças centradas, ou por um esquema de separação de vetores de fluxo de van Leer, de primeira e segunda ordem. Estes esquemas foram aplicados para solução de escoamentos em uma configuração típica de uma entrada de ar hipersônica. Resultados indicam que ambos os esquemas foram capazes de reproduzir adequadamente as características do escoamento.

INTRODUÇÃO

Algoritmos de simulação de escoamento que empregam técnicas de malhas não estruturadas vêm cada vez mais sendo utilizadas em problemas práticos de aerodinâmica.

No presente trabalho, o campo de escoamento é simulado usando as equações de Euler 2-D, discretizadas num procedimento de volumes finitos "cell centered" em malhas não estruturadas. Os fluxos na Interface são calculados por três algoritmos diferentes: um esquema tipo diferenças centradas (Jameson et al., 1981), e dois esquemas de separação de vetores de fluxo de van Leer, de primeira e de segunda ordem (van Leer, 1982). No caso de diferenças centradas, os fluxos na interface são formados a partir de um vetor médio na interface que, por sua vez, é obtido como uma média aritmética simples dos vetores de variáveis conservadas dos volumes de ambos os lados da interface. Como este esquema não possui termos de dissipação numérica para controlar instabilidades, são explicitamente colocados como termos de dissipação numérica os operadores biharmônico e laplaciano. Para o caso de separação de vetores de fluxo, utilizou-se o esquema de van Leer, de primeira e segunda ordem. A marcha no tempo é feita pelo esquema de Runge-Kutta de 5 estágios, explícito e de segunda ordem de precisão. Neste trabalho considerou-se apenas o caso de estado estacionário e, para aceleração de convergência, utilizou-se passo no tempo variável e procedimento implícito de suavização de resíduos.

Os três esquemas de discretização espacial foram aplicados para cálculo da solução em escoamentos em uma entrada de ar hipersônica. Foram variadas as condições de entrada nesta configuração de M_∞ =4 até M_∞=16, a fim de testar a grande variedade de condições de operação na entrada de ar.

O fluido foi tratado como gás perfeito. Uma justificativa para este procedimento é também apresentada em Azevedo (1992).

ALGORITMOS DE DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

Esquema Centrado. As equações de Euler 2-D podem ser escritas na forma integral, para sistema cartesiano 2_D (Azevedo, 1992) como

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_V Q\,dxdy + \int_S (E\,dy - F\,dx) = 0, \qquad (1)$$

onde V representa a área do volume de controle e S o seu contorno. Para uma malha estacionária, o vetor de quantidades conservadas Q e os vetores de fluxo convectivos são dados por:

$$Q = [\rho\ \rho u\ \rho v\ e], \qquad (2)$$

$$E = \begin{Bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e+p)u \end{Bmatrix}, \quad F = \begin{Bmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (e+p)v \end{Bmatrix} \qquad (3)$$

A nomenclatura utilizada neste trabalho é a padrão, ou seja, ρ é a densidade, u e v são componentes de velocidade cartesiana, 'e' a energia total por unidade de volume. A pressão p é dada pela equação de estado de gases perfeitos como:

$$p = (\gamma - 1)\left[e - \frac{1}{2}\rho\,(u^2 + v^2) \right], \qquad (4)$$

governantes são discretizadas num contexto "cell centered" no qual o onde γ é a razão de calores específicos

As equações vetor de variáveis conservadas para o i-ésimo volume é definido como:

$$Q_i = \frac{1}{V_i} \iint_{V_i} Q\,dx\,dy \,. \qquad (5)$$

As equações de Euler podem ser então re-escritas para cada i-ésimo volume de controle como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(V_i Q_i) + \int_{S_i} (E\,dy - f\,dx) = 0 \,. \qquad (6)$$

Deve-se observar que, para a abordagem "cell centered", o volume de controle utilizado para integração das equações governantes é formado pelo próprio elemento triangular (Batina, 1991).

No esquema centrado o operador convectivo, $C(Q_i)$, que aproxima a integral de superfície na equação (6), é definido como:

$$C(Q_i) = \sum_{1}^{3} [E(Q_{ik})\Delta y_{ik} - F(Q_{ik})\Delta x_{ik}] \,. \qquad (7)$$

Nesta expressão Q_{ik} é a média aritmética das propriedades conservadas dos volumes que fazem fronteira com a interface ik.

O procedimento de discretização espacial apresentado na equação (7) é equivalente ao esquema de diferenças centrado. Por isto, os termos de dissipação artificial devem ser adicionados para controlar instabilidades não-lineares (Jameson and Mavriplis, 1986). No presente caso, o operador de dissipação artificial, $D(Q_i)$, é formado pelos operadores biharmônico e laplaciano (Mavriplis, 1988, e Mavriplis, 1990). Estes operadores imitam, num contexto não-estruturado, o conceito de utilização dos termos de diferença segunda e quarta, como apresentado por Jameson et al. (1981) e Pulliam (1986).

Esquema "Upwind"de Primeira Ordem. A versão "upwind" do algoritmo implementado no presente trabalho calcula o fluxo na interface usando o esquema de separação de vetores de fluxo de van Leer (van Leer, 1982). O operador convectivo $C(Q_i)$, pode ser escrito como:

$$C(Q_i) = \sum_{k=1}^{3} (E_{ik}\Delta y_{ik} - F_{ik}\Delta x_{ik}) \,. \qquad (8)$$

No presente caso, os fluxos na interface E_{ik} e F_{ik} são definidos como:

$$E_{ik} = \begin{cases} E_i^+ + E_k^- & , \Delta y_{ik} \geq 0 \\ E_k^+ + E_i^- & , \Delta y_{ik} < 0 \end{cases} \,, \qquad (9)$$

$$F_{ik} = \begin{cases} F_i^+ + F_k^- & , \Delta x_{ik} \leq 0 \\ F_k^+ + F_i^- & , \Delta x_{ik} > 0 \end{cases} \,. \qquad (10)$$

Nas equações (9) e (10), $E_i^{\pm}$ e $F_i^{\pm}$ são fluxos calculados usando as fórmulas de van Leer e as propriedades conservadas do i-ésimo volume de controle. Maiores detalhes sobre a avaliação dos vetores de fluxo no contexto de van Leer podem ser obtidos em van Leer (1982), Anderson et al. (1986), e Hirsh (1990).

Esquema "upwind" de Segunda Ordem. A versão "upwind" do algoritmo de segunda ordem implementado neste trabalho considera uma abordagem MUSCL para definição dos vetores de fluxo de van Leer (van Leer, 1982). O operador convectivo $C(Q_i)$ é como o operador apresentado na equação (8), onde os fluxos na interface, E_{ik} e F_{ik} são definidos como:

$$E_{ik} = E^+(Q^-) + E^-(Q^+) \,, \qquad (11)$$

$$F_{ik} = F^+(Q^-) + F^-(Q^+) \,, \qquad (12)$$

onde Q^+ e Q^- são estados à direita e à esquerda, respectivamente, reconstruídos linearmente utilizando um limitador do tipo "minmod" (Hirsh, 1990).

DISCRETIZAÇÃO DO TEMPO

As equações de Euler discretizadas no espaço são escritas como:

$$\frac{dQ_i}{dt} = -\frac{1}{V_i}[C(Q_i) - D(Q_i)] \,, \qquad (11)$$

onde o operador $D(Q_i)$, que adiciona explicitamente os termos de dissipação artificial, é identicamente nulo quando se utiliza a discretização espacial upwind. Para avançar as equações no tempo utiliza-se neste trabalho um esquema de Runge-Kutta de 5 estágios, explicito, segunda ordem de precisão (Mavriplis, 1988). O esquema de integração no tempo pode ser escrito como:

$$Q_i^{(0)} = Q_i^n ,$$

$$Q_i^{(1)} = Q_i^{(0)} - \alpha_1 \frac{\Delta t_i}{V_i}[C(Q_i^{(0)}) - D(Q_i^{(0)})],$$

$$Q_i^{(2)} = Q_i^{(0)} - \alpha_2 \frac{\Delta t_i}{V_i}[C(Q_i^{(1)}) - D(Q_i^{(1)})],$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$Q_i^{(5)} = Q_i^{(0)} - \alpha_5 \frac{\Delta t_i}{V_i}[C(Q_i^{(4)}) - D(Q_i^{(1)})],$$

$$Q_i^{n+1} = Q_i^{(5)} , \qquad (12)$$

onde os subscritos n e n+1 indicam que estas propriedades são avaliadas no início e no fim do n-ésimo passo. Os valores utilizados para os coeficientes α foram:

$$\alpha_1 = \frac{1}{4}, \alpha_2 = \frac{1}{6}, \alpha_3 = \frac{3}{8}, \alpha_4 = \frac{1}{2}, \alpha_5 = 1. \quad (13)$$

Deve-se observar que o operador convectivo, C(Q), é avaliado em cada estágio do processo de integração, mas o operador de dissipação artificial, D(Q), é apenas avaliado nos dois primeiros estágios. Para problemas de estado estacionário, a opção de passo no tempo local foi implementada para acelerar a convergência. Detalhes da forma de implementação do passo no tempo real podem ser encontrados, por exemplo, em Azevedo (1992).

RESULTADOS

Neste trabalho utilizou-se uma configuração típica de entrada de ar hipersônica. Na Figura 1 apresenta-se uma malha típica elaborada para esta geometria. Esta malha contém 833 nós e 1450 triângulos. Porém, a malha utilizada para obtenção dos resultados aqui apresentados possui 4457 nós e 8031 triângulos.

Experimentos numéricos comprovaram que esta malha mais refinada apresentou uma melhor solução, assim como propiciou uma convergência mais rápida e com menos oscilações na queda do resíduo. Todas as soluções apresentadas foram obtidas com um número de Mach na seção de entrada $M_\infty = 12$.

A Figura 2 apresenta os contornos de Mach obtidos com o algoritmo centrado. Observa-se que as características do escoamento são bem capturadas, com exceção de algumas oscilações no choque que aparece na parede superior da entrada de ar. Estas podem ser vistas na Figura 3, que apresenta os contornos de densidade. Estas oscilações se tornam mais evidentes na Figura 8, que apresenta a variação de pressão nas paredes da entrada de ar. A pressão em ambas as paredes, superior e inferior, é mostrada na figura. Embora o esquema entrado apresente estas oscilações, este esquema é capaz de calcular precisamente reflexão e interação de choques, que ocorrem no interior da configuração e, em particular, na parcela mais à jusante do domínio de cálculo.

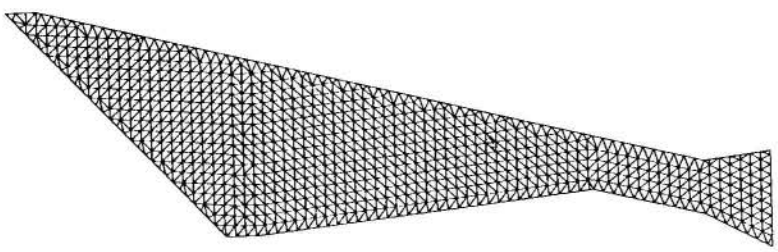


Figura 1. Malha para a entrada de ar hipersônica

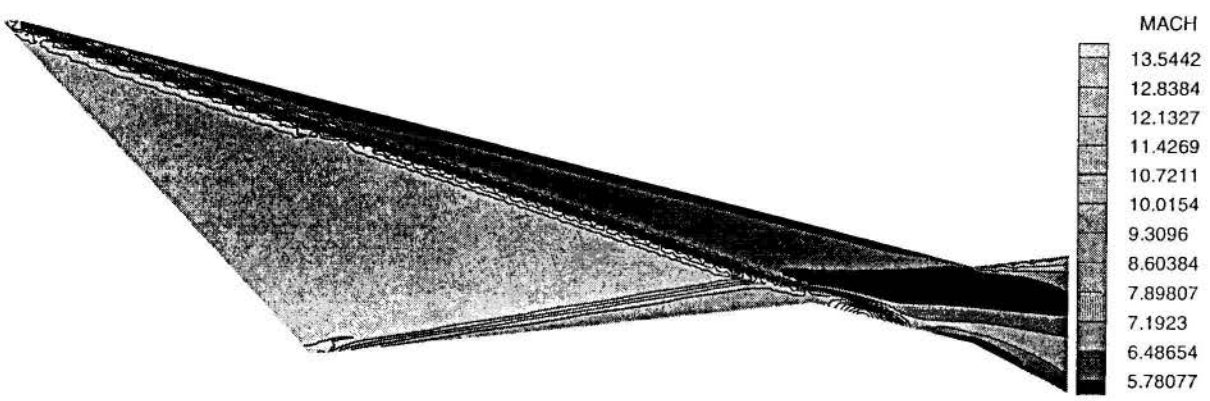


Figura 2. Contornos de número de Mach - centrado

Resultados correspondentes foram obtidos com o esquema "upwind" de primeira ordem. Estes estão apresentados nas Figuras 4 e 5, as quais apresentam contornos de número de Mach e densidade. As oscilações encontradas no esquema centrado praticamente desapareceram neste esquema.

Observa-se também destas figuras que os gradientes espaciais foram suavizados pela dissipação artificial adicionada intrinsicamente pelo método "upwind" de primeira ordem. Maior comparação de resultados pode ser observado na Figura 9, que apresenta a distribuição de pressão nas paredes da entrada de ar. Observa-se que o esquema "upwind" também apresentou oscilações na presença do choque, porém estas foram bem mais suaves que as encontradas com o esquema centrado. Isto já era esperado, visto que utilizou-se a mesma malha para obtenção de resultados e o esquema centrado é nominalmente um esquema de segunda ordem de precisão.

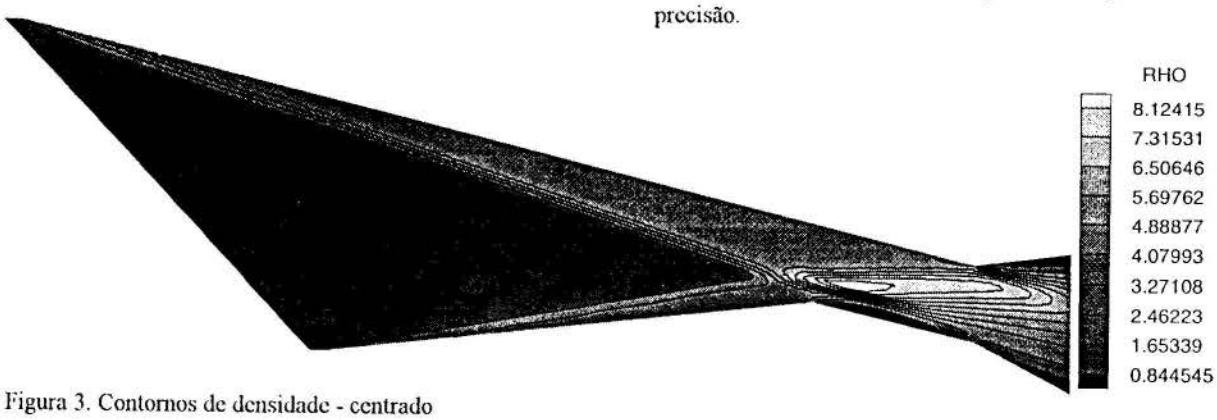


Figura 3. Contornos de densidade - centrado

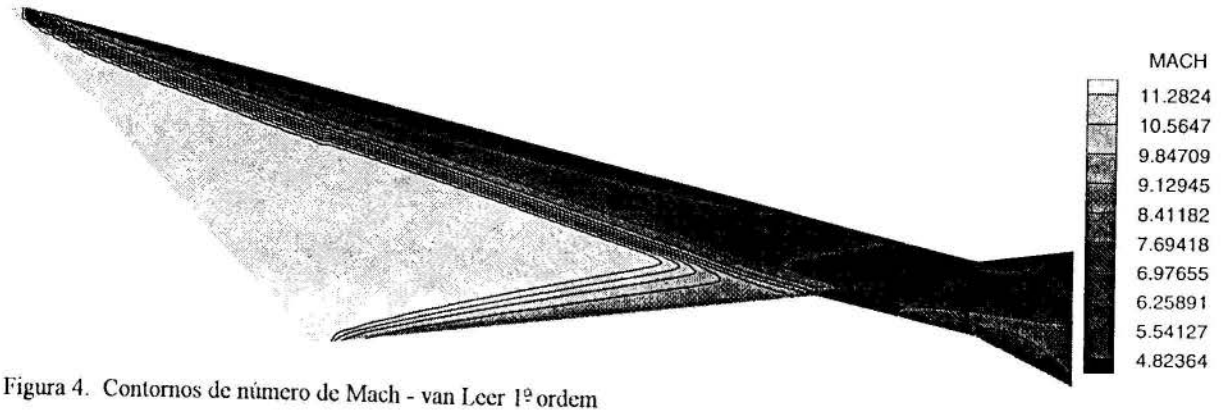


Figura 4. Contornos de número de Mach - van Leer 1ª ordem

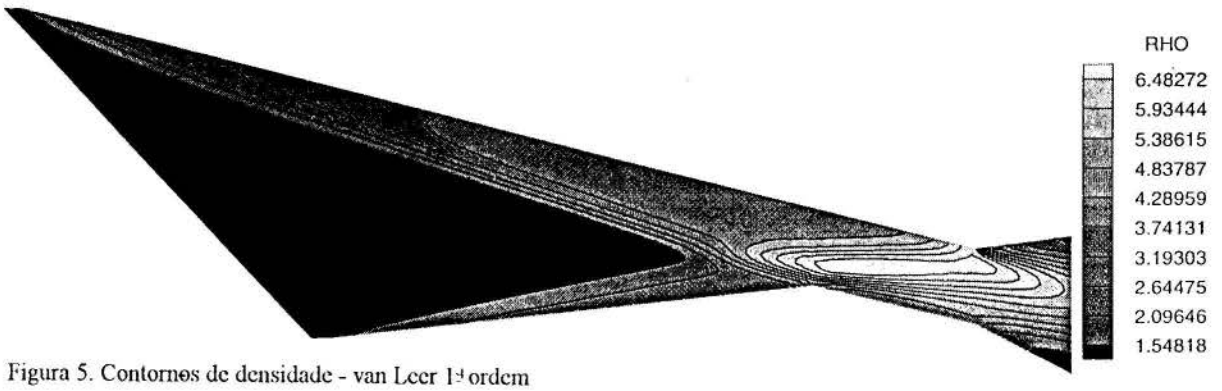


Figura 5. Contornos de densidade - van Leer 1ª ordem

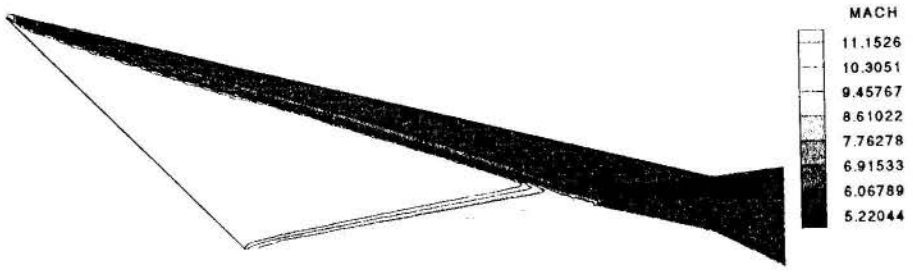


Figura 6. Contornos de número de Mach - van Leer 2ª ordem

De maneira análoga apresenta-se nos gráficos 6 e 7 os contornos de Mach e densidade, respectivamente, obtidos com o esquema "upwind" de segunda ordem de precisão. Observa-se que este esquema também consegue capturar bem as características do escoamento, embora também apresente oscilações na solução. Isto torna-se bastante nítido na Figura 10, que apresenta a distribuição de pressão nas paredes da configuração.

Com os três esquemas de discretização espacial foram testados outros valores para o Mach na entrada de ar, e observou-se que, quanto maior o número de Mach, mais oscilações aparecem, especialmete para o esquema centrado. Para o esquema "upwind" observou-se que para baixos valores de Mach, por exemplo, M_∞=4, a solução praticamente não apresenta oscilações.

Vale observar que as simulações realizadas no presente trabalho estavam inseridas em um contexto de um trabalho mais amplo, que previa inclusive a realização de ensaios experimentais para a configuração de interesse. Entretanto, por razões além do escoppo da presente discussão, o projeto foi interrompido e os testes experimentais nunca chegaram a ser realizados.

Porém, o escoamento na entrada de ar considerada é extremamente interessante, sob o ponto de vista de desenvolvimento de técnicas numéricas para escoamentos de alta velocidade, uma vez que contém muitos fenômenos de interesse no caso, como choques fortes, interações de ondas de choque e expansões rápidas. Por este motivo, os autores julgaram conveniente apresentar os resultados computacionais obtidos, mesmo sem a comprovação experimental e, principalmente, porque provávelmente os ensaios experimentas para esta configração não serão mais realizadods. Além disso, os diversos fenômenos presentes no escoamento nesta configuração são muito adequados para uma avaliação comparativa de possíveis esquemas numéricos para a solução do mesmo problema. Na realidade, esta comparação de esquemas diferentes é o propósito principal de presente trabalho. Informaçõoes extremamente úteis sobre o desempenho relativo dos algoritmos podem ser obtidas apenas da comparação qualitativa dos reesultados, que foi aqui apresentada.

Portanto, os autores acreditam que as comparaçõoes qualitativas apresentadas contribuem efetivamente para a avaliação dos métodos propostos, mesmo sem uma validação experimental.

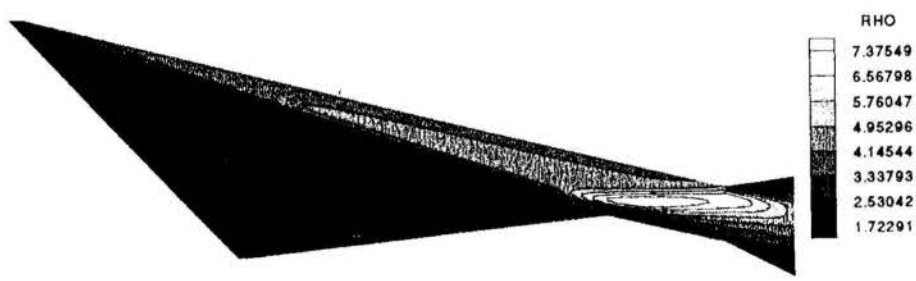


Figura 7. Contornos de densidade - van Leer 2ª ordem

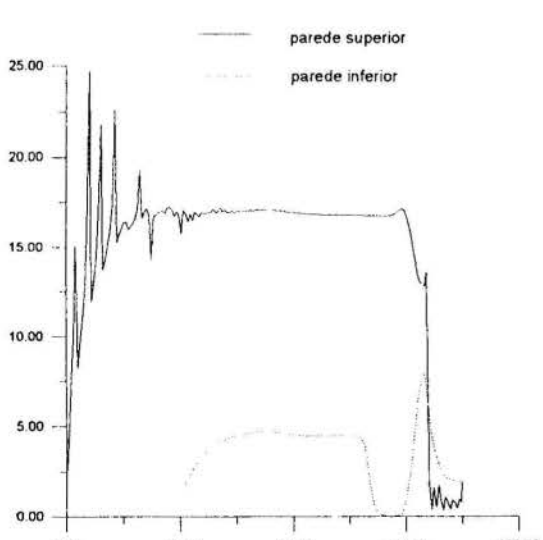


Figura 8. Pressão na Parede - esquema centrado

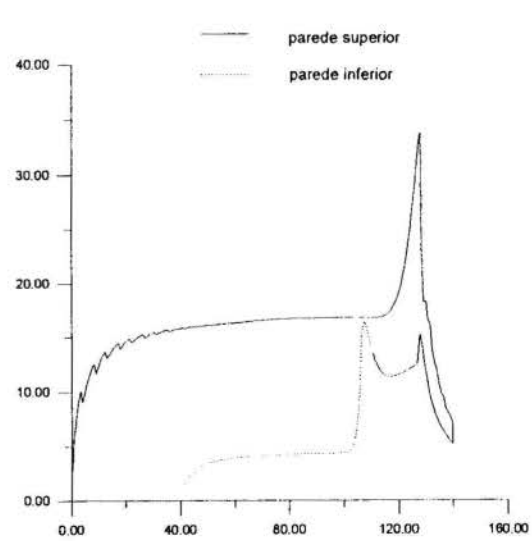


Figura 9. Pressão na Parede - van Leer

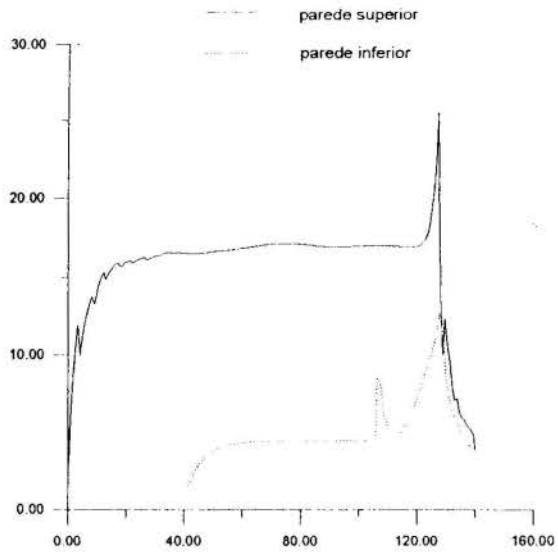


Figura 10 . Pressão na Parede - van Leer 2ª ordem.

CONCLUSÕES

O trabalho apresentou uma avaliação comparativa de três esquemas de discretização espacial para solução de escoamentos supersônicos e hipersônicos em uma configuração bidimensional representativa de entrada de ar de veículos transatmosféricos. Foram considerados um esquema centrado e duas versões do esquema "upwind" de separação de vetores de fluxo de van Leer. O código utilizado foi implementado no contexto de volumes finitos com propriedades centradas nas celas para malhas não estruturadas triangulares.

Os resultados indicam que é possível obter soluções com o esquema centrado, mesmo para escoamentos com alto número de Mach. Porém, estas soluções tipicamente apresentarão oscilações na presença de descontinuidades fortes. A fim de evitar estas oscilações espúrias, pode-se utilizar um método "upwind". No presente caso, a utilização de um esquema "upwind" de segunda ordem de precisão levou a um método que converge rapidamente para a solução de estado estacionário, se comparado aos demais. Entretanto, mesmo as soluções obtidas com este método também apresentam algumas oscilações espúrias, apesar da utilização de um limitador de fluxo do tipo "minmod". No contexto do presente trabalho, o esquema "upwind" de primeira ordem foi aquele que se mostrou mais apto a rejeitar oscilações na presença de descontinuidades, como provavelmente seria de se esperar. Entretanto, este aspecto positivo do método de primeira ordem é acompanhado por uma suavização excessiva dos gradientes espaciais da solução, o que acarreta a necessidade de um maior refinamento para se recuperar resolução espacial.

No caso do esquema "upwind" de segunda ordem de precisão, o presente estudo não explorou o efeito limitador de fluxo na qualidade da solução. Este é certamente um estudo muito importante para caracterização completa de tais esquemas, e deverá ser empreendido em um futuro próximo como continuação deste trabalho. Porém, como o problema abordado envolve essencialmente ondas de choque, e a interação destas, acredita-se que o limitador do tipo "minmod" forneça resultados comparáveis a outros limitadores mais sofisticados e mais complexos.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho recebeu suporte parcial do CNPq através de um Projeto Integrado identificado pelo Processo No. 530109/93-0. Os autores também gostariam de agradecer o suporte do CNPq através da bolsa de doutorado do segundo autor.

REFERÊNCIAS

Anderson, W.K., Thomas, J.L., and van Leer, B., 1986, "A Comparison of Finite Volume Flux Vector Splittings for the Euler Computations", *AIAA Journal*, Vol. 24, pp. 1453-1460.

Azevedo, J.L.F., 1992, "On the Development of Unstructured Grid Finite Volume Solvers for High Speed Flows", Report NT-075-ASE-N/92, Instituto de Aeronáutica e Espaço, São José dos Campos, SP, Brazil.

Batina, J.T., 1991, "Unstructured-Grid Methods Development - Lessons Learned", *Proceedings of the 4th International Symposium on Computacional Fluid Dynamics*, Vol. I, pp. 91-96, Davis, CA.

Hirsch, C., 1990, *Numerical Computation of Internal and External Flows. Vol. 2: Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows*, Chapt. 20, pp. 408-443, Wiley, New York.

Jameson, A., and Mavriplis, D., 1986, "Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on a Regular Triangular Mesh", *AIAA Journal*, Vol. 24, No. 4, pp. 611-618.

Jameson, A., Schmidt, W., and Turkel, E., 1981, "Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes", AIAA Paper 81-1259, AIAA 14th Fluid and Plasma Dynamics Conference, Palo Alto, CA.

Mavriplis, D.J., 1988, "Multigrid Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on Unstructured Triangular Meshes", *AIAA Journal*, Vol. 26, No. 7, pp. 824-831.

Mavriplis, D.J., 1990, "Accurate Multigrid Solution of Euler Equations on Unstructured and Adaptatives Meshes", *AIAA Journal*, Vol. 28, No. 2, pp. 213-221.

Pulliam, T.H., 1986, "Artificial Dissipation Models for the Euler Equations", *AIAA Journal*, Vol. 24, No. 12, pp. 1931-1940.

van Leer, B., 1982, "Flux-Vector Splitting for the Euler Equations", *Proceedings of the 8th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, E. Krause, editor, *Lecture Notes in Physics*, Vol. 170, pp. 507-512, Springer-Verlag, Berlin.

SUMMARY

The present work is concerned with performing a critical evaluation of three different spatial discretization schemes for the computation of high supersonic and hypersonic flows. Flowfields are simulated using the 2-D Euler equations wich are discretized in a cell centered based finite volume procedure on unstructured triangular meshes. Interface fluxes are calculated by either a central difference type scheme or a van Leer type flux vector splitting scheme. Both schemes were applied to the solution of cold gas inlet flows of typical transatmospheric vehicles. Results indicate that both schemes were able to adequately reproduce the expected flow features.

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS COM MALHAS NÃO-ESTRUTURADAS SOBRE CONFIGURAÇÕES AUTOMOTIVAS BÁSICAS COM UM MÉTODO PARA TODA A FAIXA DE VELOCIDADE

WLADIMYR M. C. DOURADO e JOÃO L. F. AZEVEDO
Centro Técnico Aeroespacial
Instituto de Aeronáutica e Espaço
12228-904 — São José dos Campos — SP — BRASIL

RESUMO

No presente trabalho é apresentado um método numérico para a solução das equações de Navier-Stokes bidimensionais com média de Reynolds, para todos os regimes de velocidade, em malhas não-estruturadas. Dois tipos de operadores de dissipação artificial são avaliados e os resultados são comparados com resultados analíticos e outros resultados numéricos obtidos com o FLUENT/UNS. As configurações estudadas foram a de escoamento laminar compressível e incompressível sobre uma placa plana e uma geometria automotiva tipo "cavalo-baú".

INTRODUÇÃO

A mecânica dos fluidos computacional tem se empenhado em resolver problemas de escoamento tanto em regime compressível quanto em regime incompressível. Vários métodos foram e continuam sendo desenvolvidos pela comunidade científica relacionada com este tema, buscando cada vez mais eficiência e robustez. Estes permitem estudar problemas de escoamentos cada vez mais complexos, tanto em termos de configuração geométrica quanto da física do escoamento, incluindo casos com regiões extensas de separação. Entretanto, tipicamente a comunidade desenvolveu métodos que se propõem a resolver exclusivamente problemas para escoamentos em regime compressível ou exclusivamente para regime incompressível.

O método mais popular para tratamento de escoamento incompressível é o apresentado por Patankar e Spalding (1972) e Patankar (1981), sendo baseado na solução das equações de Navier-Stokes de forma segregada e usando procedimentos de correção de pressão com formulação de volumes finitos. A discretização do domínio de cálculo é feito com malhas desencontradas ("staggered"), para evitar problemas de oscilação nos valores de pressão. Outra abordagem para calcular escoamento incompressível é a solução da equação de Poisson para pressão, buscando satisfazer a continuidade, como aborda o trabalho de Sotiropoulos e Abdallah (1992), empregando a formulação para variáveis primitivas (velocidade e pressão). Ainda com respeito a métodos que empregam a equação de Poisson para pressão, o trabalho apresentado por Gresho (1991) faz um estudo sobre alguns aspectos das equações de Navier-Stokes incompressíveis. Estes autores também mostram o cuidado existente na definição das condições de contorno para a equação de pressão.

Buscando resolver também escoamentos compressíveis, vários autores aperfeiçoaram estes métodos para permitir o tratamento deste tipo de escoamento, como Karki e Patankar (1989). Outros autores modificaram o método de correção de pressão citado, visando trabalhar com variáveis colocalizadas (por exemplo, Marchi et al., 1989 e 1990). Estes métodos possuem uma boa eficiência, observando o aspecto de razão de convergência, porém tornam-se sensíveis quanto a qualidade da discretização e os gradientes presentes.

É sabido que os métodos de correção de pressão possuem uma dissipação numérica embutida no próprio método e não permitem um controle desta dissipação de maneira direta, isto é, não existe um coeficiente ditado pelo usuário que permita uma maior ou menor quantidade de difusão numérica. Este controle é realizado via discretização numérica simplesmente, o que acaba gerando um número de pontos elevados e, no caso de malhas estruturadas, gera uma discretização elevada em regiões desnecessárias. Como consequência, o tempo de processamento e a capacidade de armazenamento tornam-se elevados, podendo tornar inviável a sua aplicacão.

Para aplicação em escoamentos transônicos e supersônicos, foram desenvolvidos métodos que resolvem o sistema de equações de Navier-Stokes para variáveis conservadas, e adotam a equação constitutiva do gás perfeito e da energia total (ou entalpia) para o acoplamento pressão-velocidade. Um dos métodos mais populares com esta abordagem é o de Beam e Warming (1978), onde o sistema de equações é resolvido por um método implícito. A dissipação artificial foi abordada por vários autores como Pulliam e Steger (1980) e Pulliam (1986) para os métodos de diferenças finitas. Na abordagem de volumes finitos para escoamentos compressíveis os trabalhos de Jameson et al. (1981) e MacCormack (1985) são tomados como referência e mostram eficiência e simplicidade para o tratamento deste tipo de escoamento. Todos os métodos que se baseiam nestes citados aqui resolvem as equações de Navier-Stokes de forma acoplada e usam variáveis colocalizadas. Isto permite uma simplicidade do código, tornando-os, por consequência, mais eficientes. A precisão e a boa definição de descontinuidades severas como choque é incontestável para estes métodos, permitindo tratar até escoamentos supersônicos com uma discretização relativamente modesta. Estes métodos, entretanto, tendem a apresentar dificuldades de convergência quando o número de Mach se torna muito baixo, e o escoamento se aproxima do limite incompressível.

O cálculo de escoamento incompressível, isto é, com número de Mach menor que 0,15, torna-se muito difícil com estes métodos que a equação da continuidade é resolvida com base na densidade. Este e outros motivos são apresentados por Chen e Pletcher (1991) para explicar porque as formulações usuais baseadas em variáveis conservadas não são adequadas para tratamento de escoamentos incompressíveis. Tendo em vista os pontos apresentados, esses autores propõem um método para solução de escoamentos para toda a faixa de velocidade. O método proposto pode ser classificado como um método de correção de pressão, da mesma forma que o esquema de Karki e Patankar (1989). Como consequência, a difusão numérica intrínseca no método não permite uma solução precisa para escoamentos transônicos e supersônicos.

Os trabalhos recentes de Martins e Azevedo (1993) e Martins (1994) mostraram uma forma viável de se ter um único código capaz de tratar tanto escoamento incompressível, com número de Mach ao redor de 0,05, até escoamentos transônicos e supersônicos. O método apresentado por estes autores tem como base as equações de Euler na forma conservativa, sendo, porém, resolvidas para as variáveis primitivas p, u, v e T. A densidade é substituída pela equação constitutiva dos gases perfeitos, ou seja, $\rho = \frac{p}{RT}$. O processo de integração temporal é baseado no método

de Beam e Warming (1978), adotando uma discretização espacial em malhas estruturadas.

O trabalho que os autores apresentam aqui consiste em adotar, basicamente, a filosofia de malhas não-estruturadas para o método proposto anteriormente. Porém, como um processo implícito de integração temporal na forma como é proposta por Beam e Warming (1978) acarretaria na solução de uma matriz de blocos esparsa, foi adotado um método de integração explícito do tipo Runge-Kutta, seguindo os trabalhos de Jameson e Mavriplis (1986) e Mavriplis (1988), entre outros. A filosofia de volumes finitos adotada baseia-se naquela apresentada por Jameson et al. (1981), empregando-o para discretização não-estruturada na forma proposta pelos autores citados anteriormente, com as variáveis centradas nos nós.

O método proposto foi avaliado neste trabalho quanto a sua aplicabilidade em soluções de engenharia, simulando o escoamento em torno de uma configuração típica automobilística do tipo "cavalo-baú". Os resultados foram comparados qualitativamente com os de um código comercial (FLUENT/UNS), que emprega o método de volumes finitos baseado em correção de pressão para malhas não-estruturadas.

EQUAÇÕES GOVERNANTES

As equações adequadas para simular os escoamentos de interesse no presente caso são as equações de Navier-Stokes compressíveis com média de Reynolds. Uma vez que os problemas de interesse serão tratados como bidimensionais, estas equações podem ser escritas em forma adimensional, com a densidade substituída pela equação de estado $\rho = \frac{p}{RT}$, como segue.

$$\frac{\partial Q(q)}{\partial t} + \frac{\partial E(q)}{\partial x} + \frac{\partial F(q)}{\partial y} = \frac{\partial E_v(q)}{\partial x} + \frac{\partial F_v(q)}{\partial y} \tag{1}$$

onde

$$q = [p, u, v, T]^T \ , \tag{2}$$

$$Q = \left\{ \begin{array}{c} \frac{p}{T} \\ \frac{pu}{T} \\ \frac{pv}{T} \\ p\left(\frac{1}{\gamma-1} + \frac{u^2+v^2}{2RT}\right) \end{array} \right\} , \tag{3}$$

$$E = \left\{ \begin{array}{c} \frac{pu}{T} \\ \frac{pu^2}{T} + Rp \\ \frac{puv}{T} \\ \left[\frac{\gamma p}{\gamma-1} + \frac{p}{2RT}\left(u^2+v^2\right)\right] u \end{array} \right\} , \tag{4}$$

$$F = \left\{ \begin{array}{c} \frac{pv}{T} \\ \frac{puv}{T} \\ \frac{pv^2}{T} + Rp \\ \left[\frac{\gamma p}{\gamma-1} + \frac{p}{2RT}\left(u^2+v^2\right)\right] v \end{array} \right\} , \tag{5}$$

$$E_v = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ \tau_{xx}R \\ \tau_{xy}R \\ [u\tau_{xx} + v\tau_{xy} - q_x] \end{array} \right\} , \tag{6}$$

$$F_v = \left\{ \begin{array}{c} 0 \\ \tau_{xy}R \\ \tau_{yy}R \\ [u\tau_{xy} + v\tau_{yy} - q_y] \end{array} \right\} , \tag{7}$$

$$\tau_{xx} = 2\mu\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3}\mu\left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right] \tag{8}$$

$$\tau_{yy} = 2\mu\frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3}\mu\left[\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}\right] \tag{9}$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu\left[\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right] \tag{10}$$

$$q_x = -k\frac{\partial T}{\partial x} \qquad q_y = -k\frac{\partial T}{\partial y} \tag{11}$$

O método desenvolvido neste trabalho é de volumes finitos, logo as equações de Navier-Stokes devem ser colocadas na forma integral. Desta forma, integrando a Eq. 1 no volume e aplicando o teorema de Green, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}\iint_V Q dV + \int_S \vec{C}\cdot\vec{n}dS = \int_S \vec{D}\cdot\vec{n}dS \ , \tag{12}$$

onde

$$\vec{C} = E\vec{\imath} + F\vec{\jmath} \ , \tag{13}$$

$$\vec{D} = E_v\vec{\imath} + F_v\vec{\jmath} \tag{14}$$

e

$$\vec{n}dS = dy\vec{\imath} - dx\vec{\jmath} \ . \tag{15}$$

Baseado em Jameson et al. (1981), é possível aplicar o conceito de média ponderada no volume, resultando em um vetor de propriedades conservadas médio, $\overline{Q}$, expresso por

$$\overline{Q} = \frac{1}{V}\iint_V Q dV \ . \tag{16}$$

Substituindo, então, as expressões acima na Eq. 12, esta resulta em

$$\frac{\partial\overline{Q}}{\partial t} + \frac{1}{V}\int_S (Edy - Fdx) = \frac{1}{V}\int_S (E_v dy - F_v dx) \tag{17}$$

A formulação apresentada para as derivadas contidas nos vetores de fluxo viscoso E_v e F_v é baseada naquela apresentada por Barth e Jespersen (1989), onde o gradiente de uma propriedade é obtido por integração ao longo da superfície que circunda o volume de controle. Estes autores discutem as condições e restrições deste tipo de abordagem para o cálculo do gradiente.

MÉTODO NÚMERICO E MARCHA-NO-TEMPO

Embora a formulação esteja escrita em forma conservativa, Eq. 1, deseja-se resolver estas equações em termos do vetor de propriedades primitivas, q. A forma encontrada para permitir esta transformação de variáveis é apresentada por Martins (1994) e Martins e Azevedo(1993), e consiste na aplicação de uma matriz jacobiana propriamente desenvolvida para esta finalidade, transformando a solução baseada em variáveis conservadas para solução em variáveis primitivas. Esta matriz jacobiana é representada por

$$D = \frac{\partial Q}{\partial q} \ . \tag{18}$$

Usando as propriedades do cálculo diferencial, pode-se obter o valor de ΔQ pela expressão

$$\Delta Q = \frac{\partial Q}{\partial q}\Delta q \ , \tag{19}$$

e seu inverso também é obtido diretamente, resultando na expressão

$$\Delta q = D^{-1}\Delta Q \ . \tag{20}$$

A matriz jacobiana D e sua inversa D^{-1} é apresentada por Martins (1994).

A discretização temporal de forma explícita é simples e direta. Os valores das propriedades no instante de tempo seguinte podem ser obtidos por

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t\left(\frac{\partial q}{\partial t}\right)^n \ . \tag{21}$$

Para efetuar a integração temporal foi utilizado um caso particular de uma vasta gama de métodos de Runge-Kutta, tendo-se escolhido um esquema de cinco estágios que proporciona forte amortecimento dos erros de alta frequência, conforme sugerido por Mavriplis (1990). Conforme este autor, o método com os coeficientes sugeridos permite trabalhar com malhas múltiplas, sendo este tipo de abordagem desejável para acelerar a convergência em malha fina para o estado estacionário, embora o trabalho apresentado aqui ainda não tenha implementado tal processo. Com base no exposto, o método de marcha no tempo fica

$$\begin{array}{l} q^0 = q^n \\ q^i = q^0 + \alpha_i\Delta t\frac{\partial(q^{i-1})}{\partial t}, i = 1, ..., 5 \\ q^{n+1} = q^5 \ , \end{array} \tag{22}$$

onde os valores de α_k são dados por Mavriplis (1990) e por Azevedo e Dourado (1991).

A expressão final para cada um dos estágios do método de Runge-Kutta, após a substituição conveniente das equações anteriores

$$q^i = q^0 - \left(D^{i-1}\right)^{-1}\frac{\alpha_i\Delta t}{V}\left[\int_S (Edy - Fdx) - \int_S (E_v dy - F_v dx)\right] \ . \tag{23}$$

DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL E DISSIPAÇÃO ARTIFICIAL

O método de discretização espacial adotado neste trabalho é equivalente a um esquema de diferenças centradas. Uma vez que o trabalho adota o conceito de volumes finitos com propriedades centradas nos nós (Mavriplis, 1990), isto significa que as integrais ao longo da fronteira do volume de controle, indicadas na Eq. 23, são avaliadas pela regra do trapézio.

O uso de uma formulação centrada causa o mesmo problema de desacoplamento das equações existente nos métodos estruturados. Para contornar este problema, é acrescentado à Eq. 23 um termo de dissipação artificial consistindo de uma combinação de operadores harmônicos e bi-harmônicos, responsáveis pelo amortecimento de erros provocados por choque e por desacoplamento, respectivamente (ver Jameson e Mavriplis, 1986, Mavriplis, 1988 e Dourado e Azevedo, 1992). Os termos de dissipação artificial são idênticos àqueles apresentados por Dourado e Azevedo (1993), exceto que no presente contexto de propriedades centradas nos nós o volume de controle para integração é formado pela união de todos os triângulos que concorrem para o nó em quetão.

CONDIÇÕES DE CONTORNO E INICIAIS

As restrições impostas pelas condições de contorno, principalmente no cálculo da condição de contorno de parede do tipo sem escorregamento, motivaram o uso da formulação com propriedades centradas nos nós. Basicamente quatro tipos de condições de contorno foram implementados para simular os casos estudados, sendo eles: condição de parede sem escorregamento, condição de parede com velocidade imposta, entrada subsônica (ou componentes de velocidade e temperatura prescritas) e saída subsônica (ou pressão prescrita). Nesta primeira etapa do desenvolvimento do método, as condições de contorno não-reflexivas baseadas nos invariantes de Riemann, sugeridas por Jameson e Baker (1983) e Long et al. (1991), não foram implementadas.

A condição de contorno do tipo parede sem escorregamento deve ser tal que não exista velocidade do fluido na parede. Esta condição é facilmente obtida com volume de controle centrado no nó, fazendo simplesmente as componentes de velocidade nulas nos nós sobre a fronteira deste tipo de contorno. A condição de parede adiabática também foi associada à parede, e o gradiente de pressão normal foi admitido nulo. Deve ser observado que a imposição de velocidade nula nos nós sobre a parede automaticamente satisfaz a condição de fluxo nulo para os termos convectivos e a condição de não escorregamento nos termos viscosos. Caso tivesse sido adotado a abordagem de volumes centrados nas celas, a imposição desta condição dependeria de cálculo de componentes tangenciais e normais à parede, não implicando em uma formulação robusta (ver Mavriplis 1990). Resumindo, as condições de contorno utilizadas na parede ficam expressas por

$$u = 0, v = 0, \frac{\partial p}{\partial \eta} = 0, \frac{\partial T}{\partial \eta} = 0 \ . \qquad (24)$$

A condição de contorno do tipo entrada (subsônica) consiste na imposição dos valores das componentes de velocidade e da temperatura nos nós definidos com este tipo de condição de contorno, enquanto que a pressão é calculada diretamente pelo método, semelhante ao apresentado para a condição do tipo parede. Quanto à condição do tipo saída (subsônica), esta consiste na imposição da pressão nos nós posicionadosna fronteira de saída. Para este tipo de condição de contorno, as componentes de velocidade e temperatura são obtidas diretamente do cálculo das equações discretizadas, como nos casos anteriores. Raciocínio semelhante é empregado para a condição de fronteira móvel, onde as componentes de velocidade são impostas e as demais variáveis são mantidas com o valor calculado pelas equações discretizadas.

RESULTADOS

Duas configurações básicas foram estudadas no presente trabalho, a primeira configuração consistindo de uma geometria bidimensional automobilística básica do tipo "cavalo-baú", tendo seus resultados comparados com os obtidos com FLUENT/UNS (para malhas não-estruturadas), e a segunda consistindo do escoamento laminar sobre a placa plana com os resultados comparados com resultados analíticos.

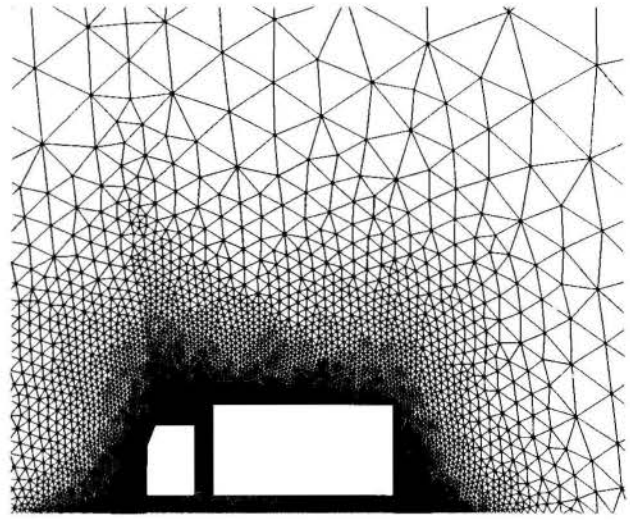


Figure 1: Malha sobre a configuração Cavalo-baú gerada pelo I-Deas.

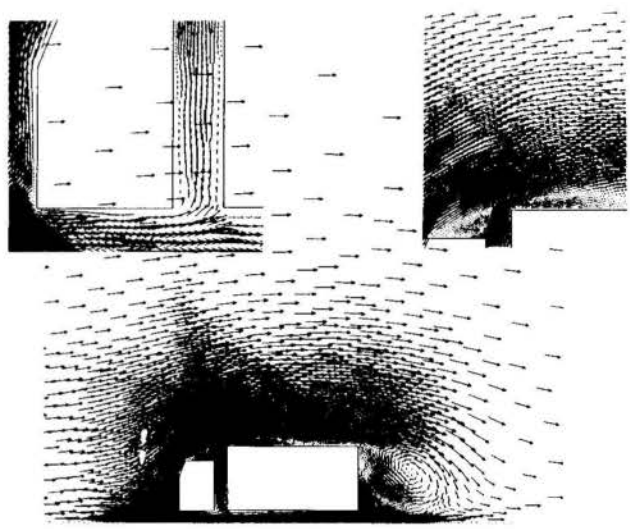


Figure 2: Campo de velocidade com a malha veicular #1 obtido com o presente método.

Para simular a presença do solo em movimento relativo ao veículo, no caso da configuração "cavalo-baú", uma condição de parede móvel foi aplicada na fronteira inferior do domínio. O veículo foi colocado em um escoamento livre com velocidade igual a $25m/s$, pressão igual a $10^5 Pa$ e temperatura ambiente igual a $293K$. O comprimento de referência foi a altura do baú, igual a $3m$, resultando em um número de Reynolds igual a $4,92 \times 10^6$. As equações apresentadas nas Eqs. 1 à 11 foram adimensionalisadas conforme apresentado por Chen e Pletcher (1991), enquanto as equações resolvidas pelo FLUENT/UNS foram usadas na forma dimensional.

A primeira malha computacional que discretiza o domínio, apresentada na Fig. 1, foi gerada pelo programa de modelamento geométrico I-DEAS, largamente empregado para as finalidades de CAD e CAE na área de análise estrutural. Esta primeira malha será chamada de malha veicular #1. Pode-se notar nesta figura que a concentração de nós se dá na região próxima ao veículo de forma uniforme, próprio de um código destinado à análise de tensões e que não sofre nenhuma espécie de informação de redistribuição de nós e de refinamento. Esta malha foi utilizada tanto pelo método apresentado aqui quanto pelo FLUENT/UNS.

O primeiro resultado com a malha veicular #1 foi obtido com o método apresentado neste trabalho, e o campo de velocidade nas proximidades do veículo é apresentado na Fig. 2. Neste caso, os coeficientes de dissipação artificial de quarta ordem e segunda

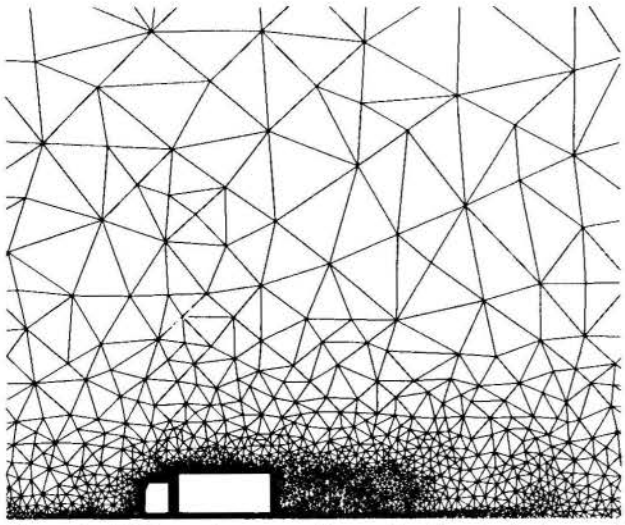


Figure 3: Malha sobre a configuração Cavalo-baú gerada pelo GEOMESH+FLEUNT/UNS.

ordem tiveram seu valores iguais a 3/256 e 0,5, respectivamente. O número de CFL para cálculo do incremento temporal foi imposto igual a 0,5 para este primeiro resultado. Na Fig. 2 pode-se observar o escoamento com recirculação na parte traseira do veículo, um escoamento preferencialmente ascendente entre o "cavalo" e o "baú", uma vista parcial da recirculação na parte superior do "baú" e um fluxo reverso sobre o "cavalo". Os contornos de número de Mach mostraram a suavidade dos resultados obtidos. Pôde-se notar também a representação do vórtice na parte traseira (escoamento de base). Os contornos de pressão sobre o veículo mostraram suavidade desta propriedade, apresentando entretanto oscilações na região da esteira mais afastada do veículo devido a discretização mais reduzida nesta região. Os contornos do rotacional da velocidade mostraram suavidade e elevada intensidade na região próxima à parede, principalmente onde existe descontinuidade da geometria.

Esta malha também foi utilizada para solução do escoamento pelo FLUENT/UNS. Os resultados com o FLUENT/UNS não estão apresentados aqui devido às restrições de espaço. Entretanto são qualitativamente bastante semelhantes aos obtidos com o método proposto no presente trabalho, exceto que apresentam estruturas vorticais mais intensas.

Para gerar uma malha com refinamento localizado, própria para tratamento de escoamento viscoso, foi escolhido a opção de obter uma malha gerada pelo GEOMESH e refinada pelo FLUENT/UNS após uma primeira rodada, ao invés de produzir um conversor de dados para o I-DEAS para usar a sua capacidade de refinamento adaptativo. A malha obtida pelo processo baseado no GEOMESH e FLUENT/UNS é apresentada na Fig. 3, sendo utilizado o τ_{xy} como critério de refinamento. Esta malha será denominada de malha veicular #2. O campo de velocidade calculado com o método apresentado, com esta discretização, é apresentado na Fig. 4, enquanto que o campo de velocidade obtido empregando-se o FLUENT/UNS é apresentado na Fig. 5. Pode-se constatar em ambos os resultados a presença de vórtices no escoamento na traseira do veículo. As maiores diferenças, neste caso consistem em: o presente método captura uma circulação reduzida entre o "cavalo" e o "baú", enquanto o código comercial captura um escoamento do tipo cavidade aberta; na parte inferior do "cavalo" observa-se uma pequena recirculação no resultado apresentado no detalhe da Fig. 5, enquanto que esta recirculação não está presente na Fig. 4; e as recirculações presentes na parte superior traseira do "cavalo" são mais intensas no resultado da Fig. 5 que naquele da Fig. 4. Nos contornos de número de Mach empregando o método ápresentado, é observada uma distribuição suave desta propriedade, semelhante ao obtido com o código comercial, sendo observadas, inclusive, as regiões de recirculação e esteira. Os resultados obtidos com esta malha assemelham-se àqueles obtidos com a primeira, utilizando o mesmo nível de dissipação artificial adotado para o primeiro caso.

O campo de velocidade obtido sobre a configuração veicular

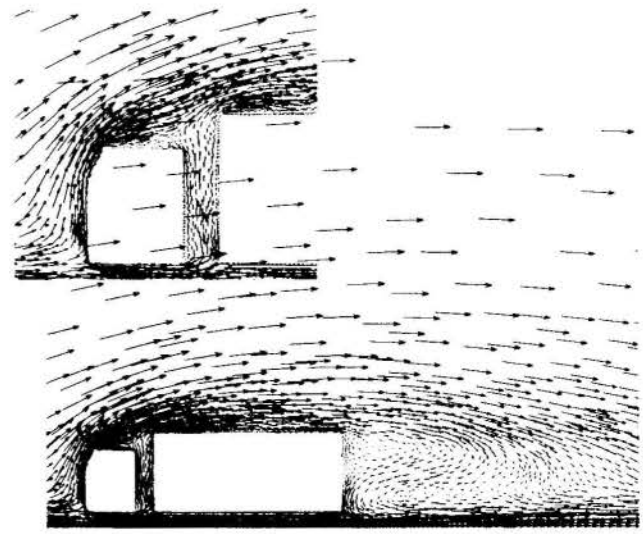


Figure 4: Campo de velocidade com a malha veicular #2 obtido com o presente método.

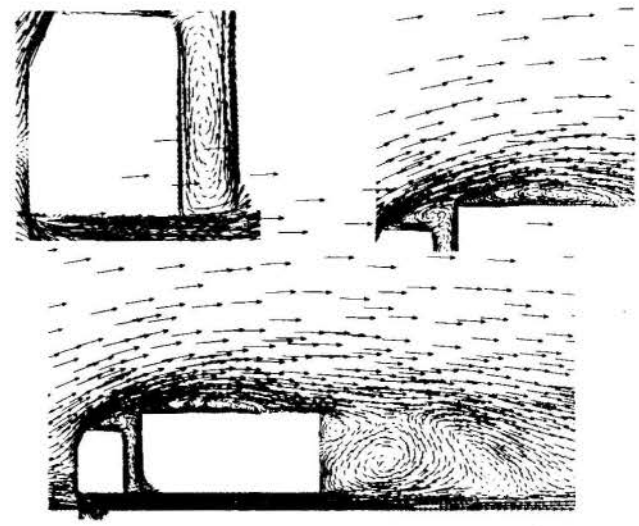


Figure 5: Campo de velocidade com a malha veicular #2 obtido com FLUENT/UNS.

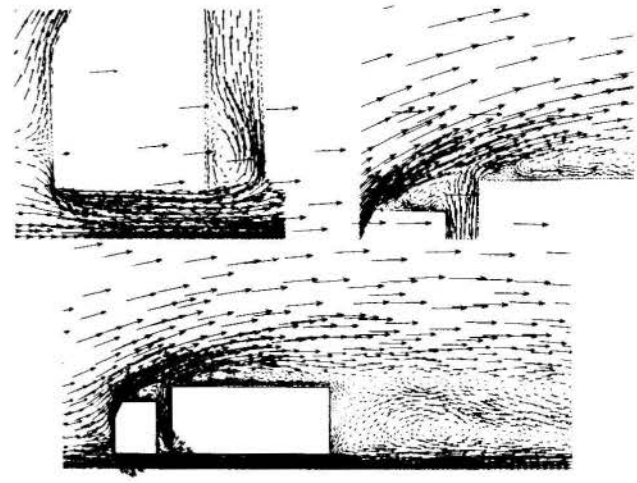


Figure 6: Campo de velocidade com a malha veicular #2, obtido com o presente método e o segundo modelo de dissipação artificial.

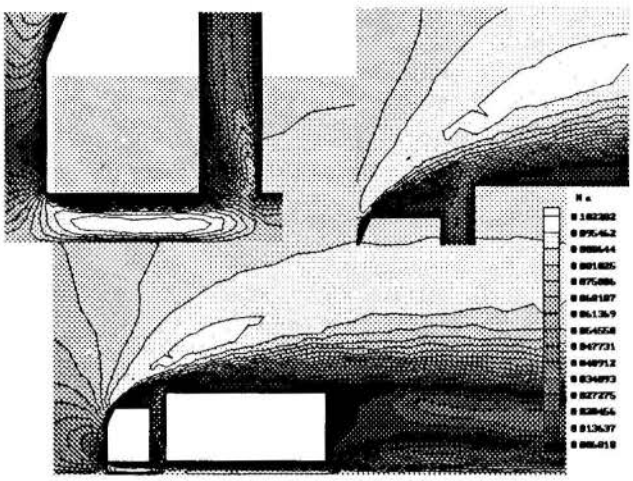


Figure 7: Contornos de número de Mach com a malha veicular #2, obtido com o presente método e o segundo modelo de dissipação artificial.

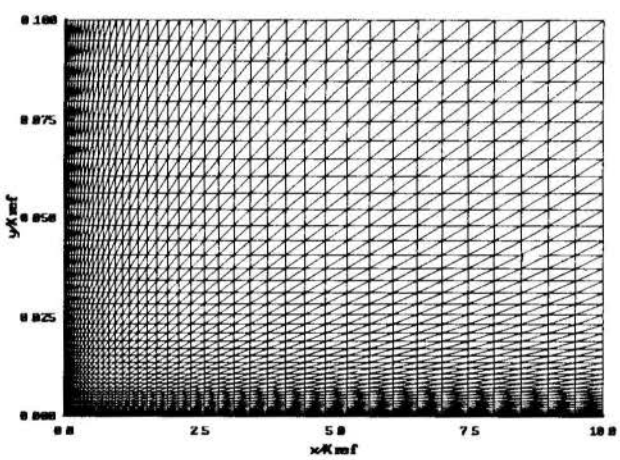


Figure 8: Malha sobre a placa plana.

com o método presente, tendo o termo de dissipação artificial modificado para ser ponderado pela velocidade característica, é apresentado na Fig. 6, onde a malha computacional é aquela empregada nos últimos resultados apresentados. Esta modificação foi realizada porque os resultados anteriores pareciam indicar a existência de dissipação artificial excessiva, o que estaria destruindo a intensidade das estruturas vorticais presentes no escoamento. Desta forma, baseado nos resultados de Marcum e Agarwal(1992), implementou-se também um procedimento de ponderação dos termos de dissipação artificial pelo maior autovalor das matrizes jacobianas. Este procedimento é também semelhante ao apresentado por Mavriplis (1990). Estes novos termos de dissipação artificial serão utilizados nos resultados apresentados a seguir.

Pode ser vista na Fig. 6 uma esteira bem mais longa na parte traseira do veículo, com vários vórtices caracterizados, regiões de recirculação na porção inferior do espaço entre o "cavalo" e o baú, na parte superior do "cavalo" e duas regiões com vórtices na parte superior do "baú". Fica nítida a considerável melhora dos resultados obtidos com este termo de dissipação. Outro detalhe que deve ser apontado é referente ao nível de dissipação artificial utilizado neste resultado, sendo igual a $1/256$ o valor da constante de quarta ordem e igual a 0.1 o valor da constante de segunda ordem. A configuração da distribuição suave do número de Mach é apresentada na Fig. 7, sendo possível facilmente identificar as regiões de recirculação e do escoamento na esteira e camada limite.

A segunda configuração avaliada como presente método consis-

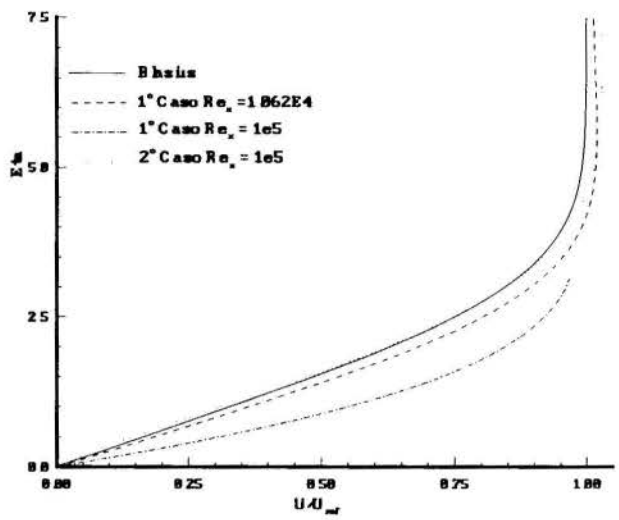


Figure 9: Perfis de velocidade U versus η para o primeiro e segundo caso.

tiu do escoamento sobre uma placa plana, em regime laminar, com número de Mach no infinito igual a $0,05$ e $0,5$. No primeiro caso a placa possuía um comprimento tal que o número de Reynolds em x encontrado no final da placa era de 10^5. No segundo caso o número de Reynolds em x para o final da placa estava em 10^6. A malha computacional utilizada é apresentada na Fig. 8.

Na Fig. 9 é apresentado o resultado normalizado e comparado com a solução de Blasius, para o primeiro caso nas estações com o Re_x indicado na figura, juntamente com um resultado do segundo caso. No primeiro caso, os termos de dissipação artificial não possuíam ponderação pelo maior autovalor, enquanto os resultados do segundo caso possuem os termos de dissipação artificial ponderados pelo maior autovalor. Pode observar o maior afastamento dos resultados para Re_x maiores para o primeiro caso. Um motivo para esta variação consiste no fato que a fronteira superior da malha computacional não possue altura suficiente para o número de Reynolds em questão, provocando interferência com as condições de contorno. Porém isto não invalida os resultados mostrado aqui pois eles são comparados a outras estações semelhantes com o segundo resultado.

A comparação com o segundo caso mostra que o termo de dissipação melhor ponderado resulta em um perfil de velocidade mais próximo do teórico. Se for observado o comportamento do perfil de velocidade ao longo de várias estações nos resultados apresentados na Fig. 10, esta influência do modelo de dissipação pode ser confirmada. Nesta figura estão colocados os resultados obtidos com o segundo caso para várias estações, sendo facilmente observado a sobrevelocidade existente na região próxima à borda da camada limite. Este problema também é percebido por Marcum e Agarwal (1992), devido ao problema de dissipação artificial e método de marcha-no-tempo.

CONCLUSÕES

Os resultados apresentados mostram a viabilidade do método ser empregado para o estudo de aerodinâmica de veículos, possibilitando trabalhar na região de baixa velocidade onde o escoamento é praticamente incompressível. A versatilidade da discretização com malhas não-estruturadas mostra também a vantagem de uma discretização localizada, permitindo tratar facilmente geometrias complexas e escoamentos com gradientes bastante localizados, como os existentes nos problemas de camada limite e esteira. A grande contribuição deste trabalho foi justamente apresentar um método que permite atacar problemas de escoamento incompressível e compressível ao mesmo tempo e com o mesmo código, e permitir uma discretização localizada de modo fácil e direto, que viabilize facilmente o refinamento auto-adaptativo.

Porém as discrepâncias com os resultados obtidos com códigos comerciais e resultados teóricos sugerem a necessidade de um maior estudo nos fatores que influenciam este método, bem como a avaliação de termos que possam melhor representar a física do

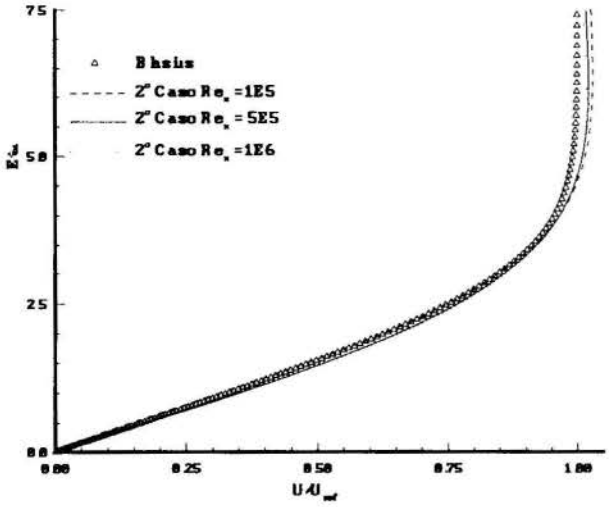


Figure 10: Perfis de velocidade U versus η para o segundo caso.

problema. Estudo de termos de dissipação artificial mais adequados, comportamento do método com o refinamento da malha e com os coeficientes de dissipação artificial devem ser vistos como tópicos para trabalhos futuros.

AGRADECIMENTOS

Os Autores agradecem à TechnoWay/MarkWay e Fluent, Inc., pelo empréstimo dos códigos FLUENT/UNS e GEOMESH, possibilitando o uso destes para simular os casos apresentados que serviram de referência neste trabalho. O trabalho recebeu suporte parcial do CNPq através do Projeto Integrado Nº 530109/93-0.

REFERÊNCIAS

Azevedo, J. L. F. e Dourado, W. M. C., 1991, "Euler Solutions of Two Dimensional Flows Using Unstructured Meshes," *Anais do XI Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, São Paulo, SP, Vol. "Azul", pp. 189-192.

Barth, T. J. e Jespersen, D. C., 1989, "The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes," AIAA Paper 89-0366, 27th Aerospace Sciences Meeting, Reno, Nevada.

Beam, R. M. e Warming, R. F., 1978, "An Implicit Factored Scheme for the Compressible Navier-Stokes Equations," *AIAA Journal*, Vol. 16, No. 4, pp. 393-402.

Chen, K. H. e Pletcher, R. H., 1991, "Primitive Variable, Strongly Implicit Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speed," *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 8, pp. 1241-1249.

Dourado, W. M. C. e Azevedo, J. L. F., 1992, "Solução de Escoamentos Não-Viscosos em Aerofólios Utilizando Volumes Finitos em Malhas Não-Estruturadas," *Anais do IV Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, Rio de Janeiro, RJ, pp. 21-24.

Dourado, W. M. C. e Azevedo, J. L. F., 1993, "Simulation of High Speed Invicid Flows With a Finite Volume Unstructured Grid Solver," *Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Brasília, DF, Vol. I, pp. 129-132.

Gresho, P. M., 1991, "Some Current CFD Issues Relevant to the Incompressible Navier-Stokes Equation," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 87, pp. 201-252.

Jameson, A., Schimidt, W., e Turkel, E., 1981, "Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes," AIAA Paper 81-1259, AIAA 14th Fluid and Plasma Dynamics Conference, Palo Alto, CA.

Jameson, A. e Baker, T. J., 1983, "Solution of the Euler Equations for Complex Configurations," AIAA Paper 83-1929.

Jameson, A. e Mavriplis, D., 1986, "Finite Volume Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on Regular Triangular Mesh," *AIAA Journal*, Vol. 24, No. 4, pp. 611-618.

Karki, K. C. e Patankar, S. V., 1989, "Pressure Based Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds in Albitrary Configurations," *AIAA Journal*, Vol. 27, No. 9, pp. 1167-1174.

Long, L. N., Khan, M. M. S. e Sharp, H. T., 1991, "Massively Parallel Euler/Navier-Stokes Method," *AIAA Journal*, Vol. 29, No. 5, pp. 657-666.

MacCormack, R. W., 1985, "Current Status of Numerical Solutions of the Navier-Stokes Equations," AIAA Paper No. 85-0032.

Marchi, C. H., Maliska C. R., DeBortoli, A.L., 1989, "The Use of CoLocated Variables in the Solution of Supersônic Flows," *Anais do IX Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Rio de Janeiro*, RJ, pp. 157-160.

Marchi, C. H., Maliska, C. R., Silva, A. F. C., 1990, "A Boundary-Fitted Numerical Method for the Solution of Three-Dimensional All Speed Flows Using CoLocated Variables," *Anais do III Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, Itapema, SC, Vol. I, pp. 351-356.

Marcum, D. L. e Agarwal, R. K., 1992, "Finite Element Navier-Stokes Solver for Unstructured Grids," *AIAA Journal*, Vol. 30, No. 3, pp. 648-654.

Martins, R. J. e Azevedo, J. L. F., 1993, "A finite Difference Method for Flow Simulations at All Speeds," *Anais do XII Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica*, Brasília, DF, Vol. I, pp. 105-108.

Martins, R. J., 1994, "Um Método deDiferenças Finitas para Simulação de Escoamento em Qualquer Regime de Velocidade," Tese de Mestrado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José dos Campos, SP.

Mavriplis, D. J., 1988, "Multigrid Solution of the Two-Dimensional Euler Equations on Unstructured Triangular Meshes," *AIAA Journal*, Vol. 26, No. 7, pp. 824-831.

Mavriplis, D. J., 1990, "Accurate Multigrid Solution of the Euler Equations on Unstructured and Adaptive Meshes," *AIAA Journal*, Vol. 28, No. 2, pp. 213-221.

Patankar, S. V. e Spalding, D. B., 1972, "A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Tree-Dimensional Parabolic Flows," *Int. J. Heat Mass Transfer*, Vol. 15, pp. 1787-1806.

Patankar, S. V., 1981, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow," Hemisphere Pub., New York.

Pulliam, T. H. e Steger, J. L., 1980, "Implicit Finite-Difference Simulations of Three-Dimensional Compressible Flow," *AIAA Journal*, Vol. 18, No. 2, pp. 159-167.

Pulliam, T. H., 1986, "Artificial Dissipation Models for the Euler Equations," *AIAA J.*, Vol. 24, No. 12, pp. 1931-1940.

Sotiropoulos, F. e Abdallah, S., 1992, "A Primitive Variable Method for the Solution of Three-Dimensional Incompressible Viscous Flows," *J. Comput. Physics*, Vol. 103, pp. 336-349.

ABSTRACT

A numerical method is presented for the solution of the 2-D, Reynolds-averaged Navier-Stokes equations. A formulation for all speed regimes is implemented in an unstructured grid context. Two types of artificial dissipation operators are evaluated, and the results are compared with analytical data and numerical results obtained with the FLUENT/UNS code. Laminar compressible and incompressible flow over a flat plate and truck-like configuration were studied in the present work.

UNSTRUCTURED MESH GENERATION: QUALITY ENHANCEMENT THROUGH SMOOTHING

Ricardo B. Auada and Julio R. Meneghini
Department of Mechanical Engineering
University of São Paulo
05508-900 - São Paulo - SP - Brazil

SUMMARY

An unstructured mesh generator using triangular elements, based on the Advancing Front Method, is presented. A diagonal changing criteria and two smoothing methods are discussed. The first, referred as Method of the Triangles, "pulls and pushes" the sides of the triangles decreasing deformation and approaching to equilateral triangles. The second, referred as Method of the Polygons, takes polygons made of neighbours triangles. One node of the mesh lays inside the polygon and this smoothing method moves that node to the centre of the polygon. The limits of smoothing are shown. Some results illustrate the whole process. Examples are shown of meshes obtained in the interior region of a wind tunnel and also in the exterior region of a group of cylinders. A qualitative analysis of generated unstructured meshes is proposed, in analogous way to the criteria presented by Meneghini and Pimenta (1989) in respective to the orthogonality of structured meshes.

INTRODUCTION

The development of algorithms based on unstructured meshes is becoming one of the most important areas of research in modern *Computation Fluid Dynamics (CFD)*. In an unstructured mesh, the number of nodes surrounding a particular one is not necessarily constant throughout the grid. This property is particularly useful when dealing with complex geometries and when one is concerned with automatic adaptivety. Examples of cases where much attention must be paid to mesh generation can be found in simulations of flow induced vibration in cross-flow heat exchangers, and wave and vortex-induced vibration problems in Marine Technology. This later case, has been extensively studied in University of São Paulo (*USP*), and *CFD* has recently paid an important role in research projects in this area.

In this paper, the *Advancing Front Method,* as defined by Peraire et al.(1990), is presented in a detailed manner and some smoothing techniques applied to generated meshes are discussed. Results of generated meshes in the interior region of a wind tunnel and the external region of a group of circular cylinders are discussed. These examples are related to those research projects being carried out in USP. In these projects the main objective is to use CFD to simulate the flow through passages with arbitrary geometry and vortex-induced vibration in group of circular cylinders. In this paper only the aspects of mesh generation are discussed. In the first of those projects a finite volume based method is used with triangular volumes and mesh points centred at the circumscripted point of each triangle. In the second one, a hybrid finite volume and a discrete vortex method, i.e. an Eulerian-Lagrangian Method, is used. The reader is referred to the book by Maliska (1995) for more information about the use of finite-volume method with unstructured meshes.

The unstructured mesh generation process is given in three steps. The first step is the generation process itself, that consists of filling up a domain with elements, here triangles. The second step consists of analysing the original mesh generated in the first step and making small arrangements through changes of some connectivity relations. And the third step is the smoothing of the mesh, that is obtained by moving the nodes to different positions that confers to the whole mesh a better configuration.

Following the same order, this text explains how to generate an initial unstructured mesh. Then, the diagonal changing process is shown, and some connectivity relations and the preparation of the mesh to be smoothed is discussed. The next section explains the smoothing process itself. Two methods are shown. A brief description of the limits of the smoothing process is given before showing and discussing some results. In the last section, the quality of generated meshes are discussed based on a quantitative measurement of a integral property, which is defined in that section. This concept is analogous of that suggested by Meneghini and Pimenta (1989) to quantify the orthogonality property of a structured mesh.

UNSTRUCTURED MESH GENERATION

The unstructured mesh generation method presented here is based upon the *Advancing Front Method*, following Peraire et al.(1990) and George (1991). This is a cyclic method that fills with triangles a determined area (The Domain). The advance is given towards the central region of the domain forcing it to be completely full of triangles. The triangles will be taken as control volumes for the application of the numerical code.

The contour of the domain is the starting point for the mesh generation process. The first step to be taken is to discretize the contour line in singular points. These points, linked by line segments, define the polygonal contour of the domain. This polygonal contour corresponds to the initial front (Figure 1).

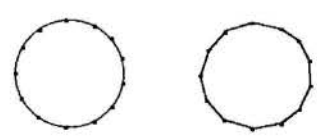


Figure 1 - The domain contour discretization.

The creation of the triangles (or elements) is given from the initial front. The segments of the front are the sides of the triangles. Each time a triangle is created the front has to be updated. The contour of the domain never changes, but the front advances towards the centre as a spiral.

Each two consecutive segments of the front define an angle α Depending on the measure of this angle, there are three different ways to follow on the triangles creation procedure. Given IL and SL, Inferior Limit and Superior Limit, respectively, these ways are defined as:

(a) for $IL \leq \alpha \leq SL$

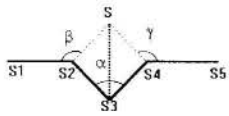


Figure 2 - Triangles generation for case (a).

Two triangles are generated in this case as the dashed lines show in Figure 2. Notice that S belongs to the bissetrix of α. George (1991) gives the following recommendation for the triangles to be approximately equilateral:

$$dSS_3 = \frac{1}{6}(2dS_2S_3 + 2dS_3S_4 + dS_1S_2 + dS_4S_5).$$

George also says that it is necessary to ensure that $\frac{\pi}{5} \leq \beta \leq (2\pi - \frac{\pi}{5})$ and $\frac{\pi}{5} \leq \gamma \leq (2\pi - \frac{\pi}{5})$.

(b) for $\alpha > SL$

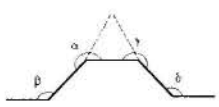


Figure 3 - Triangles generation for case (b).

One triangle is created as the dashed lines show in Figure 3. The ratio between the height and the base of the triangle has to be $\frac{\sqrt{3}}{2}$ to assure the triangles created are equilateral.

(c) for $\alpha < \frac{3}{5}\pi$ (Figure 4)

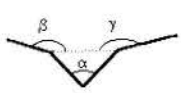


Figure 4 - Triangles generation for case (c).

One triangle is obtained through the union of the two segments, as showed by the dashed line in Figure 4. However, it is first necessary to verify the possibilities of creating triangles according to case (a) and (b). If it is not possible, then this case should be verified.

As seen in cases (a) and (b), to generate a triangle is necessary to define a new point inside the domain. The determination of this point follows the geometric criteria seen in cases (a) and (b). However, to assure that this new point is not in a bad position, it is necessary to make a verification. This verification finds out if the new element is overlaying any existing element or if it crosses the borders of the domain.

If, in spite of the conditions in cases (a) and (b) be satisfied, an irregular position for the new point is verified, the new triangle(s) cannot be created. Otherwise the triangle(s) are created and the front updated.

After the creation of a new element in the mesh, the front needs to be updated. For each one of the three cases of generating triangles, (a) through (c), there is one different process of updating the front. The processes I, II and III below refers to the cases (a), (b) and (c) respectively.

I- This is the simplest of the three processes. Two triangles are created, and the segments of the front that were used to settle the triangles, are not part of the front anymore. The two new segments that came from the creation of the triangles assume their positions in the front (Figures 5 and 6).

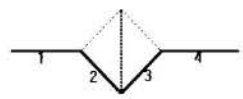


Figure 5 - Front before updating for case (a).

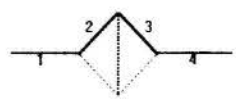


Figure 6 - Front after updating for case (a).

An example of this procedure can be seen in Figure 7:

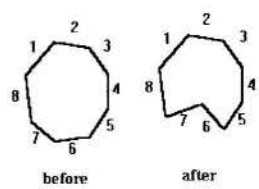


Figure 7 - Updating of the front for case (a).

II- In this process one triangle is created over a segment of the front. The front before the triangle creation can be seen in figure 8.

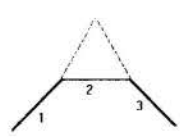


Figure 8 - Front before updating for case (b).

After the triangle creation the front turns into that of Figure 9.

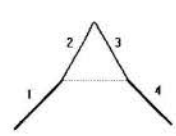


Figure 9 - Front after updating for case (b).

In this process one segment was added to the front. Because of it, the front updating process is more complex. In Figure 9, the first side of the new triangle becomes segment 2. From there on the segments are renumbered until segment 1, which is not changed. Figure 10 shows this updating of the front.

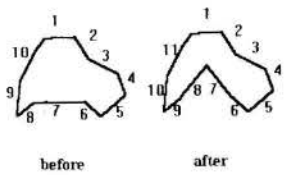


Figure 10 - Updating of the front for case (b).

III - This process is opposite to process II. One segment is subtracted from the front (figures 11 and 12).

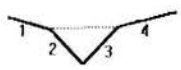


Figure 11 - Front before updating for case (c).

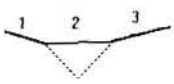


Figure 12 - Front after updating for case (c).

The new segment from the triangle created becomes segment 2. From there on the segments are renumbered until segment 1 which is not changed. An example can be seen in Figure 13.

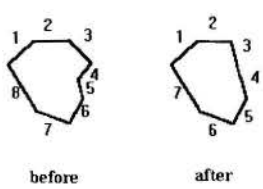


Figure 13 - Updating of the front for case (c).

The mesh generation is made through successive triangles creation. There is a pointer that indicates the segment that is being used. After the creation or not of a new triangle this pointer points to the next segment of the front. In this way, the front is roamed, the elements are created and the front updated. When the front is made only of three segments, these segments are the sides of the last created triangle and the mesh generation process is over. An example can be found in Figure 14.

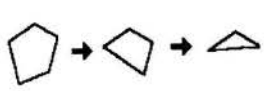


Figure 14 - End of the mesh generation

DIAGONALS CHANGING

At this point the mesh is generated and before smoothing it is desirable to adjust some aspects. Two triangular elements together make a quadrilateral (Figure 15).

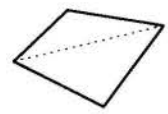


Figure 15 - A quadrilateral and a diagonal.

The dashed line is the diagonal of the quadrilateral. This diagonal is what defines the two triangles. There is another possibility for the diagonal that is shown in Figure 16.

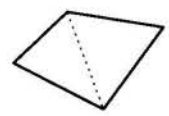


Figure 16 - A different possibility for the diagonal.

Notice that none of the nodes are moved. All the coordinates data are kept intact, only what changes is the conectivity relation between the nodes. However, there is an improvement in the quality aspect, what is exactly desirable. The criteria used to define which diagonal is the best is based on the angles of the quadrilateral. The diagonal must be in the biggest angle of all.

SMOOTHING: THE METHOD OF THE TRIANGLES

Smoothing the mesh consists in moving the nodes to enhance the quality of the elements. The connectivity relations are kept intact, but the coordinates of the nodes are changed.

The Method of the Triangles is based upon the ratio between the triangles sides. An equilateral triangle has ratio 1 because all the sides are equal. Triangles with great distortion need to be rearranged in order to obtain near to equilateral triangles. This is done by moving the nodes of the mesh (Figure 17).

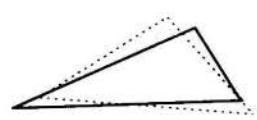


Figure 17 - A distorted triangle being smoothed.

This procedure is adopted for all triangles, one after the other. The movement of the nodes is slow in order to protect the integrity of the mesh. It is an iterative method that finishes when the nodes movement does not affect the quality of the mesh anymore.

SMOOTHING: THE METHOD OF THE POLYGONS

In this case the smoothing is based upon a polygon that is composed by all elements that have one same node in common or neighbour elements (Figure 18).

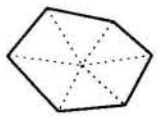


Figure 18 - A polygon formed of neighbour elements.

The common node is the central node of the polygon. The process consists of moving this node to the geometric centre of the polygon (Figure 19).

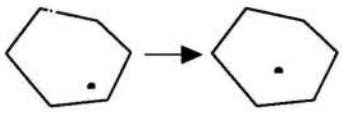


Figure 19 - Moving the central node.

The only node moved is the central one. The rest remain intact. The procedure is applied for all the polygons in the mesh. Similar to the method before, the movement must be done in small increments to ensure the integrity of the mesh. Also this is an iterative method and finishes when the nodes movement does not affect the mesh quality anymore.

THE LIMITS OF SMOOTHING

The process of smoothing the mesh is like a dispute between the elements in the Method of the Triangles and between the polygons in the Method of the Polygons. The process searches for an equilibrium of the strengths and when this is achieved, nothing else can be done, the mesh is ready.

The original mesh generated establishes the limits of the smoothing procedures and consequently the quality that can be obtained in the final mesh. Only polygons that have six sides allows the construction of equilateral triangles. Otherwise the triangles must have a distortion.

Different local refinements also brings some distortion for the triangles. The interface between elements of variable sizes does not allow the construction of equilateral triangles.

DISTORTION FACTORS

It is important to measure the quality of the mesh generated. To do this it is necessary to establish some parameters to define the distortion factors. The ratio between the smallest and the biggest side of a triangle determines the distortion of this element. The mesh is composed by elements with different areas. So it is important to take into account the influence of one element over the mesh, considering its area.

The following equation can be used to determine the Mesh Distortion:

$$MD = \frac{\sum_i A_i \cdot D_i}{A_m} \cdot 100 \quad (\%)$$

where

MD is the mesh distortion factor;

A_i is the area of element *i;*

D_i is the ratio between the smallest and the biggest side of element *i;*

A_m is the area of the mesh.

Another factor that is important to evaluate is the Maximum Element Distortion and represents the distortion of the most distorted element according to the ratio D_i. This factor is referenced as MED and is presented in a percentile value.

It is desired that both factors approach 100%, what means that the elements are equilateral. Low values represent distorted elements. So high quality meshes have higher factors.

RESULTS

Two profiles are shown here to illustrate the process. It is a half diffuser (section IPT wind tunnel) and a multiple connected domain formed by a group of circular cylinders. The mesh distortion (MD) and the maximum element distortion (MED) factors are evaluated. The figures show each step of the generation process.

The first step is the mesh generation :

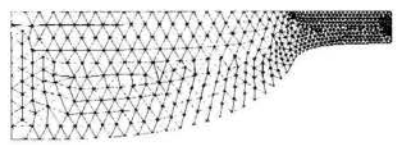


Figure 20 - MD 92,21 % MED 32,51 %.

The second step is the diagonal changing process:

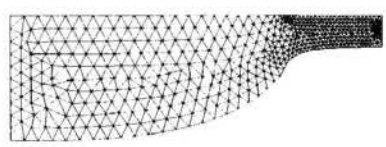


Figure 21 - MD 92,42 % MED 32,51 %.

The last step is the smoothing. There are two possible processes as discussed before, the Triangles Method and the Polygon Method. Figure 22 shows the mesh smoothed according to the Triangle Method and figure 23 shows the mesh smoothed according to the Polygon Method.

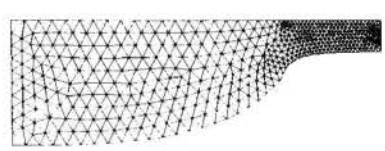


Figure 22 - MD 94,36 % MED 38,62 %.

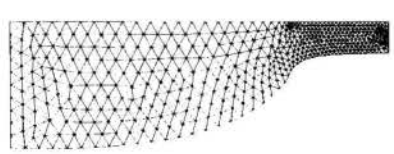


Figure 23 - MD 94,03 % MED 59,71 %.

The next figure shows the diffuser made with a horizontal mirror of figure 23 illustrating how to obtain a mesh over the whole diffuser using blocks construction.

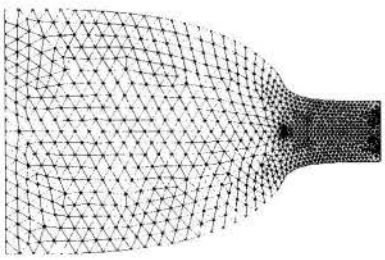


Figure 24 - Horizontal mirror image of figure 23.

A mesh of multiple connected domain is obtained in the same way. The first step is the mesh generation:

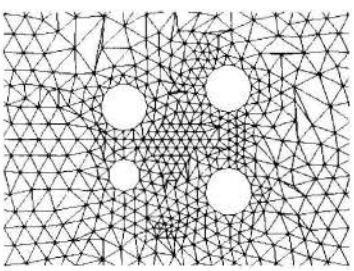


Figure 25 - MD 85,06 % MED 34,28 %.

The second step is the diagonal changing process:

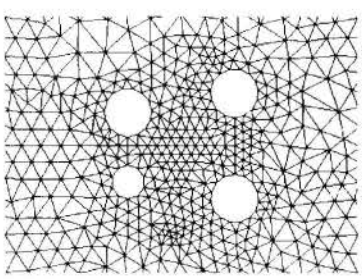


Figure 26 - MD 85,38 % MED 34,50 %.

The mesh smoothed through the Triangles Method:

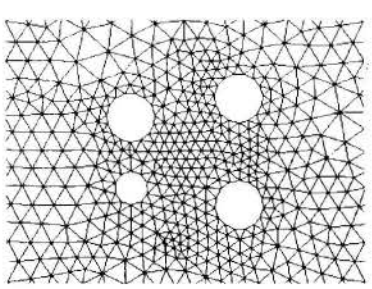


Figure 27 - MD 89,93 % MED 27,53 %.

The mesh smoothed through the Polygon Method:

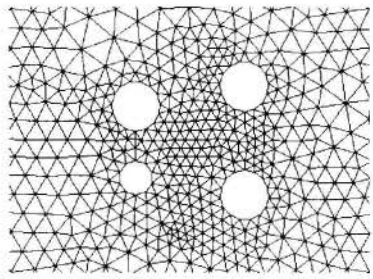


Figure 28 - MD 88,27 % MED 46,17 %.

CONCLUSIONS

The concepts of mesh generation and the definition of the distortion factors were applied to a half diffuser profile and a multiple connected domain. The smoothing methods used show different values for the distortion factors as shown in figures 22, 23 and 27, 28. It can be noticed that the smoothing process improved the distortion factors for both methods.

Factor MD gives an average of the mesh quality and factor MED gives the range of the elements distortion. Depending on the problem to be solved and the numerical code involved, one factor can be more important than the other. Future works may bring a better understanding of the importance of each factor to the mesh quality as a whole.

AKNOWLEDMENTS

The first author (RBA) is grateful to CNPq for providing him with a scholarship for his post-graduation studies at EPUSP. The computational equipment for this project has been granted by FAPESP (grant no. 94/3057-0).

REFERENCES

GEORGE, P. L. - *Automatic Mesh Generation - Application to Finite Element Methods.* **JOHN WILEY & SONS,** 1991.

MALISKA, C. R. - *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Editora LTC, Brasil, 1995.

MENEGHINI, J.R. and **PIMENTA,** M.M. - *Geração e Utilização de Malhas Orientadas de Acordo com as Fronterias do Escoamento, MSc. Thesis, Depto. Eng. Mecânica-Escola Politécnica da USP, 1989.*

MARCUM, D. L. and **WEATHERILL,** N. P. - *Unstructured Grid Generation Using Iterative Point Insertion and Local Reconnection.* **AIAA Journal,** 1995, 33:9:1619-1625.

PERAIRE, J., **MORGAN,** K. and **PEIRO,** J. - *Unstructured Mesh Methods for CFD.* **IC Aero Report 90-04** - Imperial College of Science Technology and Medicine, 1990.

PERAIRE, J., **PEIRO,** J., **FORMAGGIA,** L., **MORGAN,** K. and **ZIENKIEWICZ,** O. C. - *Finite Element Euler Computations in Three Dimensions.* **INT.J.NUM.METHODS ENG.,** 1988, 26:2135-2159.

PERAIRE, J., **VAHDATI,** M., **MORGAN,** K. and **ZIENKIEWICZ,** O. C. - *Adaptative Remeshing for Compressible Flow Computations.* **J.COMPUT.PHYS.,** 1987, 72:449-466.

PROBERT, J., **HASSAN,** O. and **MORGAN,** K. - *An Adaptative Finite Element for Transient Compressible Flows with Moving Boundaries.* **INT.J.NUM.METHODS ENG.,** 1991, 32:751-765.

PROBERT, J., **HASSAN,** O., **PERAIRE,** J. and **MORGAN,** K. - *An Adaptative Finite Element Method For Transient Compressible Flows.* **INT.J.NUM.METHODS ENG.,** 1991, 32:1145-1159.

ANÁLISE DA ACURÁCIA DE APROXIMAÇÃO DO LAPLACIANO EM VOLUMES FINITOS USANDO DIAGRAMAS DE VORONOI

Luciano Amaury dos Santos, João Flávio Vieira de Vasconcellos e
Clovis Raimundo Maliska

SINMEC - Laboratório de Simulação Numérica
em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor
Departamento de Engenharia Mecânica - UFSC
88040-900 - Florianópolis - Brasil

RESUMO: Usando diagramas de Voronoi, juntamente com o Método de Volumes Finitos, a solução numérica de um problema de condução de calor é comparada com a sua solução analítica. O objetivo é o de se analisar a influência da malha na precisão da aproximação do Laplaciano. Uma análise sobre a origem dos erros é apresentada, à luz de trabalhos que tratam de acurácia de Volumes Finitos, revelando situações onde a aproximação do Laplaciano é feita de maneira localmente inconsistente e investigando suas conseqüências.

INTRODUÇÃO

A aplicação de malhas não-estruturadas, no âmbito do método de Volumes Finitos, tem aparecido na literatura em quantidades crescentes. Cita-se os trabalhos de Taniguchi e Kobayashi (1991), Taniguchi *et alii* (1991) e Marcondes *et alii* (1994) e o livro de Maliska (1995), como exemplos.

É provável que no futuro muitos dos usuários que atualmente empregam o Método de Volumes Finitos usando malhas regulares passem a adotar malhas não-estruturadas em seus algoritmos. As razões são claras. Malhas não-estruturadas oferecem uma grande flexibilidade na discretização de domínios irregulares. Outra grande vantagem é a facilidade de refinamento local, habilidade que torna o programa computacional mais rápido e mais econômico no uso dos recursos computacionais.

Os trabalhos supracitados fazem uso de um tipo específico de malha não-estruturada. Trata-se de malhas que são geradas através de um diagrama de Voronoi.

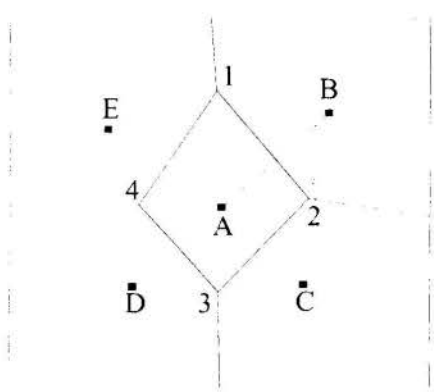


Figura 1 - Exemplo de diagrama de Voronoi

A escolha deste tipo de malha é motivada por uma característica singular que ela apresenta e que a torna especialmente indicada para problemas envolvendo Mecânica dos Fluidos ou Transferência de Calor. Malhas de Voronoi são localmente ortogonais, ou seja, a interface entre dois volumes é ortogonal à linha que une os centros destes volumes. Além disso, esta linha é dividida ao meio pela interface, contribuindo para a precisão de derivadas numéricas, ao longo da normal da interface. Estas características são válidas para todos os volumes do domínio.

Mais ainda, esta ortogonalidade local a torna especialmente interessante quando se deseja obter numericamente uma derivada normal à essas fronteiras. Esta situação surge quando utilizamos o teorema da divergência para obter aproximações de algumas formas simplificadas da equação da energia e da equação de Navier-Stokes, onde aparecem termos envolvendo o operador Laplaciano.

Procura-se neste trabalho fazer uma análise sobre a influência do tipo de malha de Voronoi na precisão do cálculo do Laplaciano. Pretende-se, com isto, provocar discussões mais profundas sobre as aproximações utilizadas nas soluções numéricas por Volumes Finitos.

CARACTERÍSTICAS DO DIAGRAMA DE VORONOI

O diagrama de Voronoi é a discretização de uma geometria onde cada volume discreto gerado é representado por um ponto gerador. A definição de um Volume de Voronoi para o espaço $\Re^2$ é:

Dado um conjunto de n pontos p e uma região do espaço $\Re^2$, o volume de Voronoi para o gerador i é o conjunto de pontos $(x, y) \in \Re^2$ que obedecem a:

$$d\left[(x, y) - p_i\right] \leq d\left[(x, y) - p_j\right] \forall\, 1 \leq j \leq n \text{ e } i \neq j \quad (1)$$

onde $d\left[(x, y) - p_i\right]$ representa a distância de (x, y) ao i-ésimo ponto gerador.

A Fig. 1 apresenta um exemplo de um diagrama de Voronoi. Pode-se observar que:

- O segmento de reta $\overline{AB}$ é ortogonal ao segmento de reta $\overline{12}$;
- A reta que passa por $\overline{12}$ passa no ponto médio de $\overline{AB}$;

• Qualquer ponto escolhido dentro do polígono $\overline{1234}$ está mais próximo do ponto A do que dos outros pontos geradores dados.

Existem na literatura apresentadas diversas maneiras de se obter um diagrama de Voronoi. O algoritmo usado no presente trabalho pode ser encontrado em Maliska Jr. (1993).

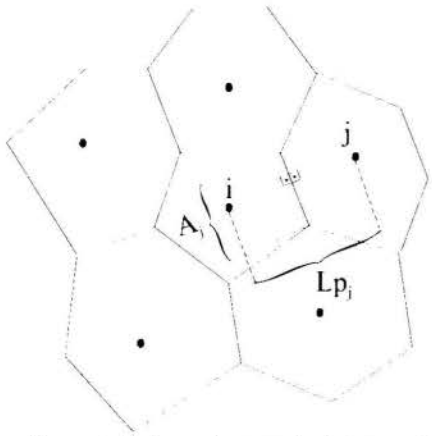


Figura 2- Volume de controle de integração

ANÁLISE DE UM PROBLEMA DE CONDUÇÃO

A análise da acurácia da aproximação do Laplaciano foi feita através do estudo de um problema de condução de calor.

A equação que governa o problema de condução é dada por

$$-K\nabla^2 T = S \tag{2}$$

onde K representa a condutividade térmica e S a geração de energia.

A equação anterior pode ser integrada em um volume de Voronoi, como o apresentado na Fig. 2. Utilizando-se o Teorema da divergência e as seguintes aproximações:

$$\int_{A_i} -K\left(\frac{\partial T}{\partial n_j}\right) dA \cong A_j\, K \frac{\left(T_i - T_j\right)}{Lp_j} \tag{3}$$

$$\int_{V_i} S dV \cong S_i V_i \tag{4}$$

obtém-se a seguinte equação:

$$\sum_{j}^{nb} \frac{A_j}{V_i} K \frac{\left(T_i - T_j\right)}{Lp_j} = S_i \tag{5}$$

onde nb representa o número de vizinhos e as demais variáveis estão detalhadas na Fig. 2.

Uma equação como esta é obtida para cada um dos volumes finitos do domínio e então um sistema de equações lineares deve ser resolvido para se obter o valor da temperatura em cada um dos centros dos volumes de Voronoi.

Usando-se série de Taylor, pode-se expressar os valores de T_j com sendo:

$$\begin{aligned} T_j = T_i + a\left(x_j - x_i\right) + b\left(y_j - y_i\right) + c\left(x_j - x_i\right)\left(y_j - y_i\right) + \\ d\left(x_j - x_i\right)^2 + e\left(y_j - y_i\right)^2 + O\left(x_j - x_i\right)^3 + \cdots \end{aligned} \tag{6}$$

onde "a", "b", "c", "d" e "e" representam os coeficientes de Taylor.

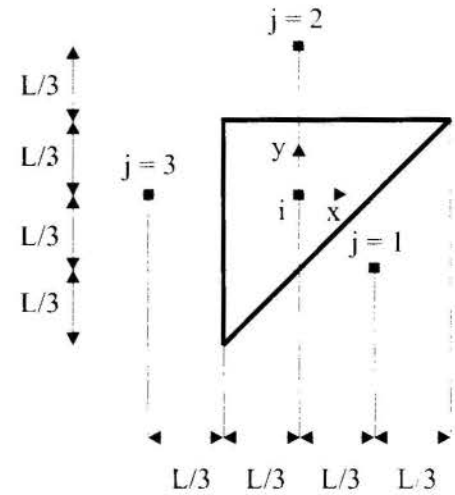


Figura 3 - Volume de controle usado na primeira análise

Sem perda de generalidade, pode-se localizar a origem do sistema de coordenadas no centro do volume i, para facilitar a análise que se segue, obtendo:

$$\begin{aligned} T_j = T_i + ax_j + by_j + cx_j y_j + dx_j^2 + \\ ey_j^2 + O\left(x^3, x^2 y, xy^2, y^3\right) \end{aligned} \tag{7}$$

A Fig. 3 representa um volume de controle que será usado para fazer a análise de consistência neste trabalho. Uma malha contendo volumes como este pode ser vista na Fig. 4. Da Fig. 3 pode-se obter todas as informações necessárias para elaborar a Tab. 1.

Tabela 1 - Características Geométricas da malha da Fig. 3.

j	x_j	y_j	A_j	Lp_j
1	L/3	-L/3	$\sqrt{2}$ L	$\sqrt{2}$ L/3
2	0	2L/3	L	2L/3
3	-2L/3	0	L	2L/3

Considerando o volume "i", Fig. 3, construiu-se a Tab. 2., fazendo uso da Eq. (7).

Substituindo os valores de $T_j - T_i$ na Eq. (5) e lembrando que para todos os volumes da malha em questão $V_i = L^2/2$, tem-se então:

$$-2K(d+e)+O(L)=S_i-\frac{2}{3}Kc \qquad (8)$$

Tabela 2 - Valores das temperaturas usando série de Taylor

j	$T_j - T_i$
1	$\frac{L}{3}(a-b)+\frac{L^2}{9}(d+e-c)+O(L^3)$
2	$\frac{2}{3}bL+\frac{4}{9}cL^2+O(L^3)$
3	$-\frac{2}{3}aL+\frac{4}{9}dL^2+O(L^3)$

Mas, substituindo a Eq. (7) na Eq. (2), em x, teremos:

$$-2K(d+e)=S \qquad (9)$$

Comparando-se as duas equações anteriores pode-se observar a presença do termo 2/3 Kc que não irá desaparecer quando $L \rightarrow 0$. Note-se, também, que "c" é uma derivada cujo valor tenderá a um valor não-nulo com a diminuição do valor de L. Logo, em tal volume sempre irá existir um erro independente do refinamento da malha.

Outros trabalhos que tratam sobre acurácia de Volumes Finitos utilizam procedimentos semelhantes ao mostrado aqui. Arts (1984), Turkel (1985), Turkel e colaboradores (1985) e Rossow e colaboradores (1988) trabalharam sobre malhas estruturadas. Roe (1987) discutiu aproximações semelhantes à aqui utilizada, mas não ficou restritos às malhas de Voronoi. Nos trabalhos supracitados foram discutidas basicamente as equações de Euler.

EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

De posse da análise anteriormente apresentada, implementou-se um programa desenvolvido para a solução do problema de condução.

O problema escolhido para realizar esta análise foi o de condução de calor bidimensional em um quadrado de lado unitário. Não há geração de calor e a temperatura é prescrita em toda a fronteira do domínio, sendo que para todas as fronteiras foi prescrito temperatura nula, com exceção da face superior onde prescreveu-se a seguinte condição de contorno

$$T(x,y=L)=\operatorname{sen}\left(\pi\frac{x}{L}\right) \qquad (10)$$

Este problema foi especificamente escolhido por ser bidimensional e por possuir uma solução analítica relativamente simples,

$$T(x,y)=\frac{\operatorname{senh}\left(\pi\frac{y}{L}\right)\operatorname{sen}\left(\pi\frac{x}{L}\right)}{\operatorname{senh}(\pi)} \qquad (11)$$

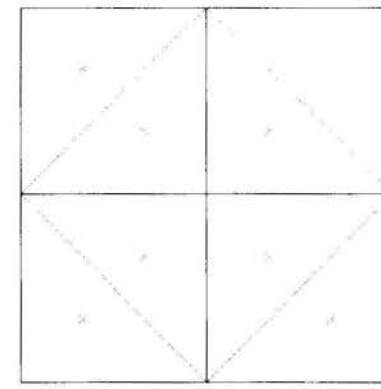


Figura 4 - Malha triangular 1

No estudo realizado usou-se quatro tipos de malhas distintas. A primeira, uma malha cartesiana escolhida por levar a uma aproximação reconhecidamente consistente e duas malhas triangulares distintas, representadas nas Figs. 4 e 5. A aproximação (5) sobre ambas as malhas triangulares é inconsistente, segundo a análise previamente realizada. Por último, uma malha contendo volumes gerados de forma aleatória foi analisada. Uma malha contendo pontos gerados de maneira aleatório pode ser vista na Fig. 6.

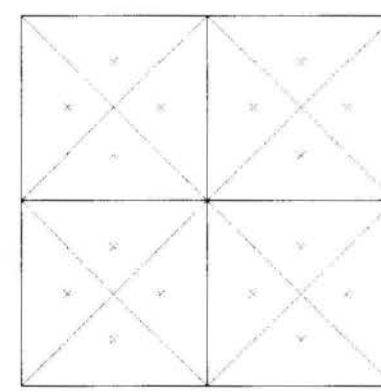


Figura 5 - Malha triangular 2

Para o cálculo do erro de cada malha, primeiramente avaliou-se o erro que cada um dos volumes através da Eq. (12). A seguir determinou-se o erro associado à malha usando-se a Eq.(13).

$$Erro_i = 100(T_{analítico} - T_{numerico}) \qquad (12)$$

$$Erro\% = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(Erro_i)^2}{N}} \qquad (13)$$

Figura 6 - Malha aleatória

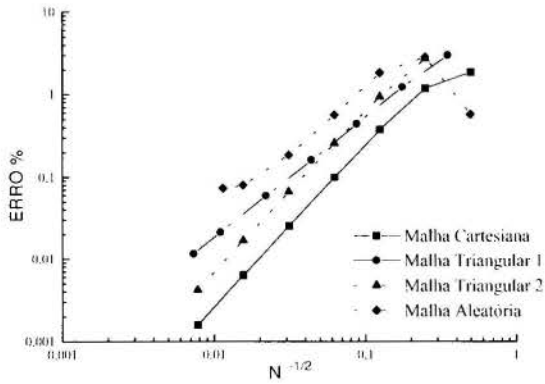


Figura 7 - Resultados obtidos

O algoritmo usado para a solução do sistema de equações lineares formado quando a resolve-se a Eq. (5) é escrita para todos os volumes do domínio, está descrito em (Pozo *et alii*, 1995).

Os resultados para cada uma das malhas citadas são apresentados na Fig. 7.

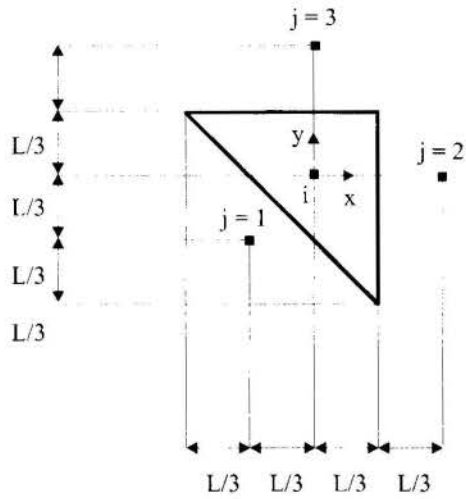


Figura 8 - Volume de controle usado na segunda análise

Tabela 3- Características geométricas da malha da Fig. 8.

J	x_j	y_j	A_j	Lp_j
1	-L/3	-L/3	$\sqrt{2}$ L	$\sqrt{2}$ L/3
2	2L/3	0	L	2L/3
3	0	2L/3	L	2L/3

Analisando a figura 7, claramente se vê que, apesar do resultado da análise anterior, em todos os casos apresentados, e em alguns outros que não estão aqui presentes, a discretização discutida se mostrou sempre eficaz.

Para entender o acontecido, fez-se a mesma análise no volume apresentado na Fig. 8, de onde pode-se obter os dados para a elaboração da Tab. 3.

Usando-se a Eq. (7), e os dados da tabela anterior, determina-se os valores de $T_j - T_i$ para o novo volume escolhido.

Substituindo os valores de $T_j - T_i$ na Eq. (5) obtém-se:

$$-2K(d+e) + O(L) = S_i + \frac{2}{3}Ke \qquad (14)$$

Assim, pode-se observar que o erro independente de malha continua presente na aproximação sobre este segundo volume analisado, mas com sinal oposto ao que aparecia naquela feita sobre o volume da figura 3.

Como nas malhas triangulares analisadas ambas os volumes aparecem lado a lado, e como ambos possuem as mesmas dimensões, é natural se esperar que o erro da aproximação sobre cada um deles seja semelhante, mas com o sinal invertido. Na média os efeitos desses erros se cancelam. Certamente uma explicação para a malha aleatória teria de ser mais sofisticada.

Para diagramas de Voronoi sobre polígonos regulares uma análise similar mostra a ausência de termos de erro independente da malha. Excelentes resultados podem ser encontrados na literatura usando malhas híbridas de Voronoi, resultantes da combinação de tipos distintos de malhas de Voronoi regulares (Marcondes, 1996) e (Palagi, 1992).

Tabela 4- Valores das temperaturas usando série de Taylor

j	$T_j - T_i$
1	$\frac{L}{3}(b-a) + \frac{L^2}{9}(c+d+e) + O(L^3)$
2	$\frac{2}{3}aL + \frac{4}{9}dL^2 + O(L^3)$
3	$-\frac{2}{3}bL + \frac{4}{9}eL^2 + O(L^3)$

A partir de gráficos, como o mostrado na Fig. 7, pode-se avaliar a ordem do erro de truncamento presente na aproximação da equação diferencial. Considerando-se que o erro de truncamento ε_t é proporcional à potência n-ésima do tamanho dos volumes de controle

$$\varepsilon_t = C(\Delta x)^n \qquad (15)$$

sendo n a ordem da aproximação. Tem-se, então, que n é o coeficiente angular das curvas mostradas da Fig. 7 (na escala log-log). Estas curvas devem tender a retas para $\Delta x \approx N^{-1/2}$ suficientemente pequenos, permitindo, desta forma, a

determinação inequívoca de n. Para as curvas apresentadas na Fig. 7, os valores de n são os seguintes:

Tabela 5 - Ordem dos resultados apresentados na Fig. 7

Tipo de Malha	n
Cartesiana	1,9988
Triangular 1	1,4835
Triangular 2	1,9974

De fato esses valores não são uma medida absoluta da acurácia da discretização discutida. A medida de erro utilizada aqui é uma das que estão presentes na literatura.

Poder-se-ia ter tomado, por exemplo, o erro máximo no conjunto de pontos da malha. Por esta medida o comportamento da malha aleatória mostrou-se ainda mais irregular. Os valores de n se alteraram levemente para as demais malhas.

Poder-se-ia, ainda, realizar uma avaliação mais precisa da norma da função resíduo fazendo-se uma integral dessa função sobre o domínio.

De qualquer forma esses resultados já constituem um ponto de partida para outras discussões.

CONCLUSÕES

Inferimos desta experiência que o desaparecimento dos erros parece ter uma forte ligação com a regularidade da malha. Esta parece ser uma característica de várias aproximações localmente inconsistentes, revelada já no clássico exemplo do método de DuFort-Frankel (Richmeyer e Morton, 1967) e mais claramente na interessante discussão da discretização de bloco centrado para a equação de Laplace sobre malha irregular feita por Aziz e Settari (1979).

Sobre os resultados obtidos com a malha aleatória deve-se tomar um certo cuidado ao interpretá-lo. Como os pontos geradores foram distribuídos de forma aleatória no domínio, não há nenhuma garantia que exista uma homogeneidade na sua distribuição. Não há uma relação clara entre o número de pontos e um Δx como existe para as outras malhas. Mas certamente o resultado apresentado reforça a tese de que malhas regulares favorecem o desaparecimento de erros.

Aparentemente o uso de diagramas de Voronoi evita o problema (solução incorreta e independente de malha) encontrado por Bruschke e Advani (1994) na utilização de aproximações semelhantes às que levaram à equação (5) em malhas mais genéricas. Pode-se dizer que o objetivo principal deste trabalho é levar aos leitores a dúvida dos autores sobre as condições necessárias (sobre a forma das equações que se pretende aproximar e sobre a geometria da malha) para a validade deste tipo de aproximação.

O estudo aqui é, ainda, um tanto inconclusivo. Percebe-se, por enquanto, claros sinais que uma certa regularidade da malha é desejável, por favorecer um comportamento monótono da convergência dos resultados com o refino da malha. Esta é uma característica importante para a realização de uma boa avaliação dos erros de uma solução numérica (Roache, 1993).

Este estudo sugere a realização de um trabalho matematicamente mais profundo e mais interessante do que este. Ao longo deste trabalho a análise da acurácia de uma metodologia mostrou-se mais complexa do que a obtenção de uma expressão para o erro de truncamento local de uma aproximação para a equação diferencial de interesse, utilizando séries de Taylor tão simplesmente.

Um caminho, diferente do seguido neste trabalho, foi mostrado por Palagi (1992), que em apêndice da sua tese, trabalhou sobre as semelhanças entre o CVFEM (*Control Volume Finite Element Method*) e o tipo de aproximações discutido aqui (que aquele autor utilizou no seu trabalho, com a denominação de CVFD, *Control Volume Finite Difference*), para justificar a confiança neste tipo de método, quando a discretização do domínio é feita por diagramas de Voronoi.

AGRADECIMENTOS

Os dois primeiros autores agradecem ao CNPq, pelo suporte financeiro. Os autores agradecem também as discussões motivadoras realizadas com os professores Antonio Fábio C. da Silva, Francisco Marcondes e Luis Antônio Scola.

REFERÊNCIAS

Arts, T., 1984, *On the Consistency of Four Different Control Surfaces Used for Finite Area Blade-to-Blade Flow Calculations*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 4, pag. 1083-1095.

Aziz, K. e Settari, A., 1979, *Petroleum Reservoir Simulation*, Elsevier Applied Science Publishers.

Bruschke, M. V. e Advani, G., 1994, *A Numerical Approach to Model Non-Isothermal Viscous Flow Through Fibrous Media with Free Surfaces*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 19, pag. 575-603.

Maliska, C. R., 1995, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*, Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro.

Maliska Jr., C. R., 1993, *Um Robusto Gerador de Diagramas de Voronoi para Discretização de Domínios Irregulares*, XIV Congresso Ibero Latino-americano sobre Métodos Computacionais para Engenharia, pag. 753-762, São Paulo.

Marcondes, Francisco, Zambaldi, M. C. e Maliska, C. R., 1994, Simulação Numérica de Reservatórios de Petróleo Utilizando Malhas de Voronoi, *V Encontro Nacional de Ciências Térmicas*, pag. 335—338, São Paulo.

Marcondes, Francisco, 1996, *Solução Numérica Usando Métodos Adaptativos-Implícitos e Malhas de Voronoi de Problemas de Reservatório de Petróleo*, Tese de Doutoramento, Universidade Federal de Santa Catarina, Santa Catarina.

Palagi, C., 1992, *Generation and Application of Voronoi Grid to Model Flow in Heterogeneous Reservoir*, Ph. D. Dissertation, Stanford University, Stanford.

Richtmyer, R. D. e Morton, K. W., 1967, *Difference Methods for Initial Value Problems*, Interscience Publishers.

Roe, P. L., 1987, Error Estimates for Cell Vertex Solutions of the Compressible Euler Equations, *ICASE Report*, n°87-6, EUA.

Pozo, R., Remington, K. A. e Lumsdaine, A., 1995, *SparseLib++ - Sparse Matrix Class Library - Reference Guide*, disponível via anonymous ftp em gams.nist.gov: ftp/pub/pozo/src.

Roache, P. J., 1993, A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies, FED-ASME, Vol. 158, pag. 109-120.

Rossow, C., Kroll, N., Radespiel, R. e Scherr, S., 1988, Investigation of the Accuracy of Finite Volume Methods for 2- and 3-Dimensional Flows, *AGARD Conference Proceedings*, Vol. 2, n° 437, França.

Taniguchi, N., Arakawa, C. e Kobayashi, T., 1991, Construction of a Flow-Simulating Method with Finite Volume Based on a Voronoi Diagram, *JSME International Journal*, Série II, Vol. 34, pag. 18—23.

Taniguchi, N. e Kobayashi, T., 1991, Finite Volume Method on the Unstructured Grid System, *Computers & Fluids*, Vol. 19, n° 34, pag. 287—295.

Turkel, Eli, 1985, Accuracy of Schemes with Nonuniform Meshes for Compressible Fluid Flows, *ICASE Report*, n° 85-43, EUA.

Turkel, E., Yaniv, S. e Landau, U., Accuracy of Schemes for Euler Equations with Non-Uniform Meshes, *ICASE Report*, n° 85-59, EUA.

ABSTRACT

In this paper numerical solutions of a heat conduction problem, obtained using Finite Volume approach and Voronoi grids are compared with analytical solution. The purpose of this comparison is to analyze the grid influence on the numerical errors. An analysis of the source of this errors is also made.

ABCM

MALLAS IRREGULARES EN DIFERENCIA FINITA: ECUACIÓN DE TRANSPORTE TRANSIENTE*.

Luis F. Carvajal
Departamento de Mecánica
Universidad Técnica F.Santa María
Casilla 110-V-Valparaíso -Chile

RESUMEN

Este artículo presenta un método que permite discretizar en mallas irregulares generales las ecuaciones de transporte en dos y eventualmente en tres dimensiones. El método utiliza soluciones locales cerradas de la ecuación de transporte para generar las ecuaciones discretizadas apropiadas al cálculo del transiente, sin requerir de la evaluación de series para el cálculo de las coeficientes de ellas. Los puntos de la malla de organizan en "estrellas"compuestas de un punto central que hace de origen local y otros en la vecindad. Las ecuaciones se obtienen mediante la aplicación de las soluciones en las estrellas.

INTRODUCCIÓN

La modelación numérica de las ecuaciones de transporte ha recibido considerable atención en las últimas décadas (Roache, 1976). En particular las ecuaciones de Navier Stokes (Temam, 1979), las de Reynolds para flujo turbulento y las derivadas de los numerosos modelos disponibles para la representación de los efectos turbulentos (Ferziger, 1983).

Para el caso de ecuaciones de transporte en mallas regulares los desarrollos se han perfeccionado hasta poder incorporarlos en códigos comerciales como PHOENICS, FLUENT, FLOW3D, CFD200/STORM,etc. Estas mallas incluyen las rectangulares, formadas con líneas paralelas con distancias no necesariamente iguales entre sí, y mallas ortogonales ya sean las correspondientes a mallas cilíndricas o esféricas o las generadas mediante transformación conforme para adaptarse al contorno.

La utilización de mallas iregulares libres de las restricciones de las mencionadas presentan ventajas en la utilización de los recursos computacionales pues su refinación puede efectuarse exclusivamente en las zonas que lo requieran sin que se produzcan refinaciones donde no se necesite.

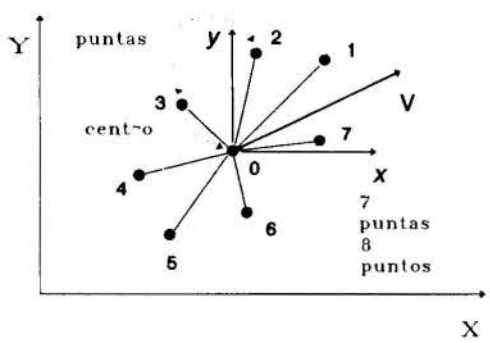


Figura 1 - Elementos de la estrella.

Perrone (1975), Chung (1981), Tseng (1984) y otros han presentado tratamientos de mallas irregulares generales. En general su aplicación se ha limitado a problemas con efectos de convección pequeños. Su desarrollo, basado en el truncamiento de la serie de Taylor presenta los inconvenientes típicos de los esquemas de diferencia centrada para números de Peclét elevados.

El presente método utiliza soluciones locales cerradas de la ecuación de transporte evaluadas en las puntas de las estrellas para generar las ecuaciones discretizadas apropiadas al cálculo del transiente. De este modo no se hace necesario la evaluación de series para calcular los coeficientes de las ecuaciones como es el caso en el método de Chen (1980).

DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO

Agrupación de Nodos en Estrellas. La malla se define mediante las "estrellas", ilustradas en la figura 1, conformadas por un punto central y N puntos próximos o "puntas de la estrella ". Cada estrella genera una ecuación utilizando un sistema local de coordenadas (x, y). Las coordenadas del punto central son $x_0 = 0$ e $y_0=0$, y las de las puntas x_k e y_k con k = 1, ... ,N.

Ecuaciones Discretizadas. Considérese un set de N+1 funciones independientes entre sí φ_i (x,y) con i=0,...,N para dos dimensiones (o bien φ_i (x,y,z) para tres dimensiones) de las cuales las primeras N son soluciones de la ecuación de transporte homogénea (ver tabla 1)

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi)-\frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi)+\frac{\partial}{\partial x}(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y})=0 \quad (1)$$

y donde la N+1 ésima función φ_N es una solución particular de la ecuación no homogénea

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi)-\frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi)+\frac{\partial}{\partial x}(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y})=Cte \quad (2)$$

La expresión siguiente, que no incluye la solución particular φ_N,

$$\phi_h(x,y) = \sum_{0}^{N-1} C_i * \varphi_i(x,y) \qquad (3)$$

es solución de la ecuación estacionaria (1).

Si en la ecuación de transporte transiente

$$-\frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi) - \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma\frac{\partial\phi}{\partial y}) = \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) \qquad (4)$$

se sustituye la expresión

$$\phi(x,y) = \phi_h(x,y) + \phi_p(x,y) = \sum_{i=0}^{N} C_i\varphi_i(x,y) \qquad (5)$$

donde φ_N es la solución particular de (2), se obtiene una expresión para la derivada respecto al tiempo (miembro derecho de la ecuación transiente) en función del coeficiente C_N de la solución particular φ_N

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi)\right]_{x,y} = C_N\frac{\rho^2 V^2}{\Gamma} = Cte \qquad (6)$$

Al evaluar (5) en los puntos k de una estrella, se genaran N+1 ecuaciones para determinar las constantes C_i

$$\phi_k \equiv \phi(x_k, y_k) = \sum_{i=0}^{N} C_i\varphi\ (x_k, y_k) \qquad k = 0,\ldots,N \qquad (7)$$

donde ϕ_k representa el valor de la función ϕ en el punto k de la estrella en un instante dado. Definiendo $\varphi_0 = 1$, la expresión (5) puede reescribirse:

$$\sum_{i=1}^{N} C_i * [\varphi_i(x_k, y_k) - \varphi_i(0,0)] = \phi_k - \phi_0 \quad k = 1,\ldots,N \qquad (8)$$

De este sistema de ecuaciones se determina el coeficiente de la solución particular C_N en función de los valores ϕ_k, el que sustituído a su vez en (6) permite generar los diferentes algoritmos de integración que se señalan más adelante. El sistema de ecuaciones indicado en (8), se muestra escrito más compacto en (9) para definir las matrices **M**, **C** y $\Delta\phi$.

$$[\varphi_i(k) - \varphi_i(0)]\,[C_i] = [\phi_k - \phi_0] \qquad (9)$$

$$\mathbf{M}\ \mathbf{C} = \Delta\phi \qquad (10)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{M}^{-1}\ \Delta\phi \qquad (11)$$

$$\mathbf{M}^{-1} \equiv [g_{i,j}] \qquad (12)$$

C_N se obtiene de (11) resultando la expresión

$$C_N = \sum_{1}^{N} g_{N,j} * (\phi_j - \phi_0) \qquad (13)$$

si $\mathbf{M}^{-1}$ existe.

Sustituyendo (13) en (6), expresando la derivada respecto al tiempo según el método de Euler con los superíndices **n** y **n+1** para el tiempo en los esquemas de tiempo atrasado y tiempo adelantado se obtienen las expresiones (14) y (15) las que en conjunto con las expresiones obtenidas de las otras estrellas , generan los algoritmos implícito y explícito respevtivamente.

$$-\sum_{k=1}^{N}\frac{\rho V^2\Delta t}{\Gamma}g_{N,k}\phi_k^{n+1} + \phi_0^{n+1}\left[1 + \sum_{k=1}^{N}\frac{\rho V^2\Delta t}{\Gamma}g_{N,k}\right] = \phi_0^n \qquad (14)$$

$$+\sum_{k=1}^{N}\frac{\rho V^2\Delta t}{\Gamma}g_{N,k}\phi_k^{n} + \phi_0^{n}\left[1 - \sum_{k=1}^{N}\frac{\rho V^2\Delta t}{\Gamma}g_{N,k}\right] = \phi_0^{n+1} \qquad (15)$$

El análisis de las bondades del método pasa por el examen de la dominancia diagonal de las matrices del esquema de iteración resultante y de los signos de sus elementos para la convergencia a perfiles "realistas". Esto está principalmente determinado por los g_{Nj} , elementos de la matriz en (12) que a su vez es la inversa de la matriz **M** de elementos $\varphi_i(x_k, y_k) - \varphi_i(0, 0)$ o en otros términos dependen principalmente de las soluciones φ utilizadas y de las coordenadas locales de las puntas de estrellas o puntos de evaluación k.

Tabla 1 - Soluciones φ de la ecuación de transporte.

i	Funcion φ_i
0	1
1	$my - nx$
2	$\exp(mx + ny)$
3	$(my + nx)\exp mx$
4	$(my + nx)\exp ny$
5	$(my - nx)\exp(mx + ny)$
6	$\exp mx$
7	$\exp ny$
8	$mx + ny$

De estas nueve funciones, sólo la última φ_8 , es solución particular. En la tabla 1, m, n y V^2 representan respectivamente $\rho u/\Gamma$, $\rho v/\Gamma$ y $u^2 + v^2$.

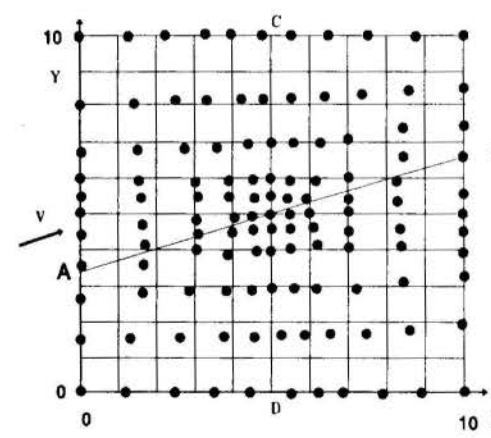


Figura 2 -Región y malla del problema

EL PROBLEMA MODELO

El caso en estudio representa el transporte de la variable ϕ en la región indicada en la figura 2. Los valores iniciales de ϕ

se definen iguales a 1 en la zona por sobre el trazo AB y cero en la inferior. En el contorno los valores de ϕ permanecen constantes. La velocidad V es uniforme en toda la región, paralela a AB, permaneciendo constante en el tiempo. El trazo AB está ubicado tal que pasa por el centro de la región.

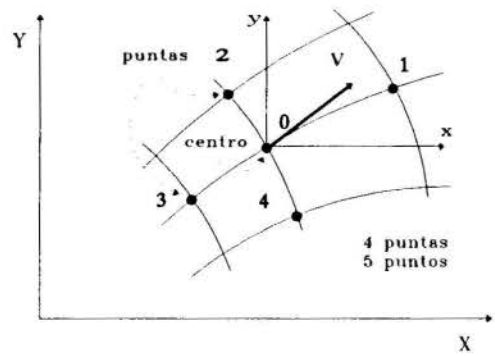


Figura 3 - Estrella de 5 puntos tipo a

Se ha experimentado en una región cuadrada con una velocidad uniforme V inclinada en un ángulo α respecto del

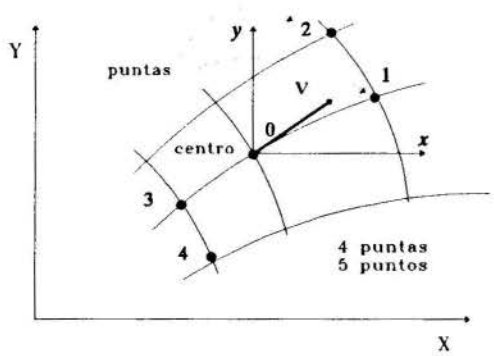


Figura 4 -Estrella de 5 puntos tipo b

eje horizontal X. Este caso ha sido empleado por Leonard (1979), Raithby (1975) y Pattel (1988) entre otros, pues permite algún grado de comparación con soluciones analíticas.

Se han utilizado estrellas de cinco puntos con las soluciones homogéneas φ_0, φ_1 , φ_2 , φ_5 y la no homogénea φ_8. Se han utilizado además dos configuraciones de estrellas las que se muestran en las figuras 3 y 4.

Se han empleado también los métodos explícitos e implícitos sin detectar mayores diferencias cuando ambos funcionaron. Por esta razón junto a su mayor rango de convergencia, se trabajó con el método implícito. Si bien el método aplica al desarrollo del transiente, la experimentación se ha desarrollado principalmente hasta alcanzar el estado estacionario.

RESULTADOS

Los valores de ϕ que se muestran a continuación en la figura 5, corresponden a puntos sobre la recta CD calculados sobre mallas regulares con 10 divisiones iguales, para números de Peclét, Pe≡ $\rho V \Delta X/\Gamma$, iguales a 1, 5, 10, 20 y 50. Para la figura 6 se mantienen todas las condiciones con la sola

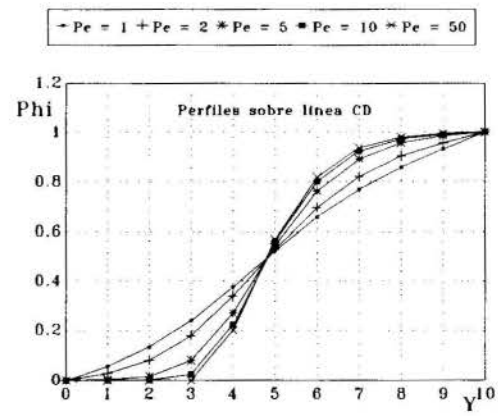


Figura 5 Perfiles de Phi en malla regular

diferencia que se trabaja sobre la malla irregular. De la malla irregular, sólo los siete puntos centrales están sobre la línea CD. Los cuatro restantes, en los extremos, están algo desplazados. Los tres puntos centrales de la malla regular coinciden con tres puntos de la malla irregular. El ángulo α es 11.309932 en todos los casos. La estrella es la mostrada en la figura 3. Nótese el perfil "irreal" resultante para V=50.

En la figura 7 se sobreponen resultados en la malla regular

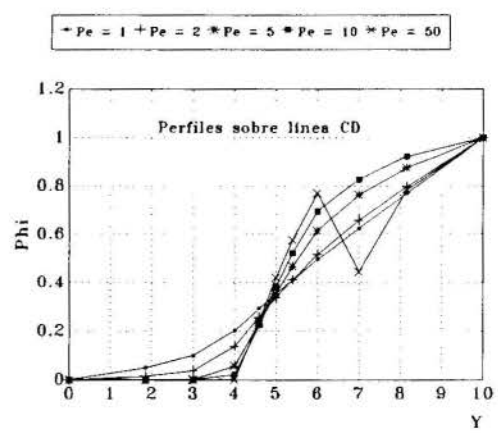


Figura 6 - Perfiles de Phi en malla irregular

para V=50 (Peclét=50), para los casos de estrellas a (figura 3) y estrella B (figura 4). Además se incluye el resultado para la malla irregular con V=50 utilizando la estrella B (figura 4). Nótese ahora que el perfil es "real".

En la figura 8 se muestran resultados de la solución analítica del problema modelo utilizado por Raithby (1975). El caso contempla difusión sólo en el sentido perpendicular al flujo (igual a cero en la dirección del flujo) de ecuación

$$\rho V \frac{\partial \phi}{\partial r} = \Gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial n^2} \qquad (16)$$

la que se puede considerar equivalente en puntos suficientemente alejados del contorno y números de Peclét elevados, al problema de conducción transiente unidimensional en una región infinita donde el tiempo se ha reemplazado por r/V, y con la función escalón como condición inicial. En la misma figura aparece también el resultado en la malla irregular empleando la estrella b de la figura 4 con V igual a 50.

DISCUSIÓN

De acuerdo a la ecuación (14), generada en una estrella, el método implícito es convergente a valores realistas si los elementos de la matriz local $g_{N,j}$ son positivos pues así resulta que la matriz asociada es diagonal dominante para Δt positivo. Al aplicar el método a mallas regulares cuadradas utilizando las mismas funciones φ referidas anteriormente y la estrella tipo a, puede demostrarse que el coeficiente C_N de la ecuación (13) resulta

$$C_N \frac{\rho^2 V^2}{\Gamma^2} = -\phi_{i+1,j} \frac{m}{\Delta x(e^{m\Delta x}-1)} - \phi_{i,j+1} \frac{n}{\Delta y(e^{n\Delta y}-1)} + \phi_0 \left[\frac{n(e^{n\Delta y}+1)}{\Delta y(e^{\Delta y}-1)} + \frac{m(e^{m\Delta x}+1)}{\Delta x(e^{m\Delta x}-1)} \right] - \\ - \phi_{i-1,j} \frac{me^{m\Delta x}}{\Delta x(e^{m\Delta x}-1)} - \phi_{i,j-1} \frac{ne^{n\Delta y}}{\Delta y(e^{n\Delta y}-1)} \qquad (17)$$

lo que sustituído en (6) da para los elementos $g_{N,j}$ ($i \neq j$) sólo valores positivos.

En mallas irregulares se detectó la existencia de elementos $g_{i,j}$ negativos, lo que ilustra en la figura 6 el perfil con V=50, el que converge a un perfil "irreal". Nótese que en este caso (algúnos $g_{N,j}$ negativos) la diagonal dominancia de la matriz asociada depende del valor de Δt.

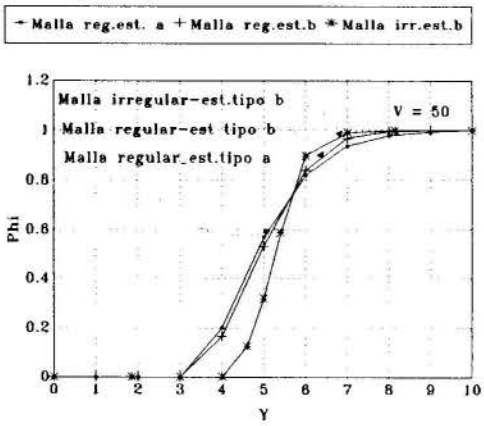


Figura 7 -Perfil en mallas reg. e irregulares

Los signos (y los valores) de los $g_{N,k}$ dependen además de la distribución de las puntas de la estrella alrededor del centro. Es así como la aplicación de la estrella b en la misma malla genera $g_{N,k}$ positivos dando los resultados en la figura 7 los que aparecen notoriamente más realistas.

En base a la expresión de Van Davis y Mallinson (1972)

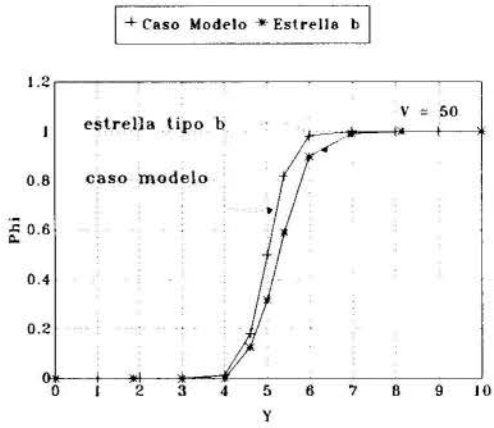


Figura 8 - Comparación con el caso modelo

en relación a la falsa difusión que aparece en algunos eaquemas numéricos de la que se deduce la conveniencia de orientar un eje coordenado con las líneas de flujo, se experimentó con la estrella tipo b de la figura 4. que utiliza puntos más alineados en el sentido del flujo. Resultados comparativos con la estrella inicial se muestran en la figura 7. Como ya se indicó se verifica además la eliminación del perfil inconveniente para V=50. El mejor comportamiento respecto a la difusión falsa se aprecia en la figura 8 donde el perfil aparece con una tendencia mucho más aproximada a la solución modelo que también se muestra.

En la actualidad el autor está estudiando la influencia que tienen factores como la geometría de la estrella, las diferentes funciones φ, el número de funciones φ (o lo mismo, el número de puntos de la estrella) y el número de Peclét sobre la diagonal dominancia de las matrices relacionadas y los signos de sus elementos.

* Este trabajo se ha desarrollado en el marco del proyecto Fondecyt n° 1960531/96

REFERENCIAS

Chen, C. J. y L, P. ,1980, "Finite Analytical Numerical Method for Steady and Unsteady Heat Transfer Problems", ASME paper 80-HT-80.

Chung, K. C., "A Generalized Finite Difference Method for Heat Transfer Problems in Irregular Geometries", 1981, *Numerical Heat Transfer,* Vol. 4 , p 345.

Ferziger, J.H., (1983), "Higher Levels Simulation of Turbulent Flows", *Computational Methods for Turbulent, Transonic and Viscous Flows",* J. A. Essers, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, *,pp. 93-182.*

Leonard, B. P., (1979), "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering",* Vol. 19, pp. 59-98.

Perrone, N. y Kao, R., (1975), "A General Finite Difference Method For Arbitrary Meshes", *Computers and Structures,* Vol. 15 p. 45.

Raithby, G. D., (1975), "A Critical Evaluation of Upstream Differencing Applied to Problems Involving Fluid Flow", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 9, pp. 75-183.

Roache, P. J., (1976), *"Computational Fluid Dynamics"*, Hermosa Publishers, Albuquerque.

Temam, R., (1979), *Navier Stokes Equations"*, North Holland.

Tseng, A. A., (1984), "A Generalized Finite Difference Scheme for Convection Dominated Metal Forming Processes", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, p. 1885.

de Van Davis, G. y Mallinson, G. D. (1972), "False Diffussion in Numerical Fluids Mechanics", Report 1972/FMT/1, University of New South Wales.

ABCM

UM ALGORITMO EM VOLUMES FINITOS PARA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE ESCOAMENTOS TRANSÔNICOS COM ONDA DE CHOQUE

ERNESTO RIBEIRO RONZANI
Depto. de Eng. Mecânica e de Materiais
Instituto Militar de Engenharia
22290.270 - Rio de Janeiro, RJ, Brasil

ANGELA OURIVIO NIECKELE
Depto. de Eng. Mecânica
Pontifícia Universidade Católica
22453.900 - Rio de Janeiro, RJ, Brasil

SUMÁRIO

As metodologias desenvolvidas recentemente para solucionar escoamentos de fluidos a qualquer número de Mach, usando a técnica de volumes finitos, apresentaram algumas dificuldades na solução de escoamentos em regime transônico com onda de choque. Este trabalho apresenta um algoritmo para a solução numérica desses tipos de problemas, propondo técnicas de redução da excessiva difusão artificial na região próxima ao choque, apresentada nos outros métodos, obtendo-se resultados mais precisos. O método é verificado em dois problemas distintos, através da comparação com soluções analíticas e numéricas da literatura.

INTRODUÇÃO

Recentemente vários trabalhos surgiram para solucionar escoamentos de fluidos a qualquer velocidade em geometrias irregulares, por exemplo, MacCormack (1982), Eidelman et al. (1984), Silva e Maliska (1987) e (1988), Maliska e Silva (1989), Karki e Patankar (1989), Marchi et al. (1990), Dermirdzic et al. (1993) e Marchi e Maliska (1994). Eles estenderam a aplicabilidade de metodologias concebidas para a solução de escoamentos a altos números de Mach para a solução de escoamentos a baixos números de Mach e vice-versa, permitindo a solução de escoamentos em regime transônico. Nesses casos a dependência da massa específica com a velocidade torna-se tão significativa quanto com a pressão. As formulações mais recentes consideram a pressão como uma variável principal e a massa específica é acoplada à pressão através de uma equação de estado. Esta escolha permite o uso das mesmas variáveis em todos os tipos de escoamentos, já que as variações da pressão são sempre finitas a qualquer número de Mach.

Para solucionar numericamente escoamentos de fluidos compressíveis em regime transônico com onda de choque alguns trabalhos usaram esquemas de primeira ordem. Estes apresentaram resultados imprecisos devido a difusão artificial surgida na solução numérica, produzindo excessiva dissipação na região do choque, atenuando em demasia as variações e a descontinuidade característica desse fenômeno. Outros trabalhos usaram esquemas de segunda ordem, obtendo resultados satisfatórios na região do choque. Porém, os esquemas numéricos de ordem superior são de difícil convergência e podem apresentar oscilações irreais na região pós-choque. Alguns pesquisadores tentaram o refinamento da malha para reduzir a difusão artificial. Esta prática resultou em choques mais acentuados porém com convergência mais difícil e lenta.

Neste trabalho é apresentado um método de solução numérica de problemas de escoamentos de fluido a qualquer número de Mach em geometrias complexas, usando um sistema de coordenadas não-ortogonais. A técnica de volumes finitos é usada com uma configuração de malha co-localizada para todas as variáveis dependentes. Para melhor solucionar escoamentos de fluidos em regime transônico com onda de choque utiliza-se um método especial de interpolação da massa específica na face do volume de controle. Esta é necessária à avaliação do termo convectivo das equações de conservação e dos fluxos de massa da equação da continuidade. A massa específica é interpolada dos valores nos pontos nodais vizinhos através de uma média ponderada entre a interpolação linear e uma aproximação "upwind". Este método de interpolação reduz a excessiva difusão artificial na região próxima ao choque, apresentando resultados mais precisos.

EQUACIONAMENTO

As equações diferenciais que governam a conservação da massa ($\phi = 1$), quantidade de movimento linear para os componentes cartesianos ($\phi = u, v$), energia ($\phi = T$) podem ser resumidas em uma forma geral como:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla.\vec{J} = S \qquad \text{onde:} \quad \vec{J} = \rho\vec{V}\phi - \Gamma\nabla\phi \qquad (1)$$

Nestas equações, ϕ é uma variável dependente qualquer geral, ρ é a massa específica, Γ é o coeficiente de difusão efetivo, $\vec{V} = \vec{V}(u,v)$ é o vetor velocidade e S indica a fonte (ou sumidouro) volumétrica de ϕ. $\vec{J}$ é o fluxo total de ϕ, isto é, inclui tanto o fluxo convectivo quanto o difusivo.

Além das equações diferenciais apresentadas, é necessária mais uma equação de estado para solucionar os problemas de escoamentos de fluidos compressíveis que tem a forma:

$$\rho = \rho(P, T) \qquad (2)$$

Neste trabalho utiliza-se um sistema bidimensional de coordenadas para descrever e transformar as equações de conservação relacionadas aos princípios físicos. A idéia básica do uso de um sistema de coordenadas curvilíneas não-ortogonais (ξ,η) ajustado ao domínio físico consiste em coincidir alguma linha, de ξ ou η constante (superfícies coordenadas), com cada contorno da região física do problema. Com os valores das coordenadas curvilíneas especificados sobre os contornos, a região interna fica com valores gerados por essas coordenadas. Em conseqüência, o espaço físico fica determinado por coordenadas curvilíneas (ξ,η), como variáveis dependentes, e as coordenadas cartesianas (x,y), como variáveis independentes, isto é, $\xi(x,y)$ e $\eta(x,y)$.

Condições de Contorno. Em regime transônico as perturbações de pressão originadas em qualquer ponto do escoamento propagam-se em todas as direções com velocidade finita. Em

conseqüência, as propriedades na entrada do fluxo dependem das variações a jusante do escoamento. É mais conveniente empregar as propriedades de estagnação isoentrópicas locais, especificamente a pressão e temperatura de estagnação na entrada do escoamento.

No contorno de saída do fluxo há necessidade de especificar uma condição de contorno, já que a região de influência das perturbações é ilimitada e o valor na saída do fluxo afeta o interior do domínio. A prática mais comum é assumir que a pressão estática seja conhecida.

MÉTODO DE DISCRETIZAÇÃO

O domínio computacional, para facilitar a solução numérica, é obtido por uma transformação de coordenadas, em que as coordenadas cartesianas (x,y), usadas para descrever o domínio físico, tornam-se variáveis dependentes e as coordenadas curvilíneas (ξ,η) tornam-se variáveis independentes. Desde que um valor constante de uma coordenada curvilínea tenha sido especificado em cada contorno, segue-se que esses contornos no domínio físico corresponderão a linhas horizontais ou verticais no domínio computacional. Assim, se o incremento da coordenada curvilínea for o mesmo em todos os segmentos, o domínio computacional será composto de figuras retangulares elementares.

As equações discretizadas são obtidas através da técnica de volumes finitos proposta por Patankar (1980), integrando as equações de conservação em coordenadas curvilíneas sobre o volume de controle elementar regular, do domínio computacional, $\Delta\forall = Ja\,\Delta\xi\,\Delta\eta$, mostrado na Fig.(1), onde os pontos nodais principais são indicados por letras maiúsculas e as faces do volume por letras minúsculas, isto é,

$$\int_{\Delta\forall}\frac{1}{Ja}\left\{\frac{\partial}{\partial\xi}\underbrace{\left[\rho U\phi-\left(\Gamma Ja\,g^{11}\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)\right]}_{Je\,ou\,Jw}+\frac{\partial}{\partial\eta}\underbrace{\left[\rho V\phi-\left(\Gamma Ja\,g^{22}\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)\right]}_{Jn\,ou\,Js}\right\}d\forall =$$

$$=\int_{\Delta\forall}\frac{1}{Ja}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\underbrace{\left(\Gamma Ja\,g^{12}\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right)}_{JSe\,ou\,JSw}+\frac{\partial}{\partial\eta}\underbrace{\left(\Gamma Ja\,g^{21}\frac{\partial\phi}{\partial\xi}\right)}_{JSn\,ou\,JSs}\right]d\forall+\int_{\Delta\forall}S\,d\forall \qquad (3)$$

Onde o jacobiano é $Ja = x_\xi\, y_\eta - x_\eta\, y_\xi$ e g^{ij} os componentes do tensor conjugado ou recíproco do tensor métrico, definidos na forma $g^{11} = (x_\eta^2 + y_\eta^2)/Ja^2$; $g^{12} = g^{21} = -(x_\xi x_\eta + y_\xi y_\eta)/Ja^2$ e $g^{22} = (x_\xi^2 + y_\xi^2)/Ja^2$. As derivadas parciais de x (ou y) ao longo das linhas coordenadas ξ e η são representadas por x_ξ e x_η (ou y_ξ e y_η), respectivamente. Os componentes contravariantes são definidos nas formas: $U = y_\eta\, u - x_\eta\, v$ e $V = x_\xi\, v - y_\xi\, u$.

A primeira e segunda integrais de volume na Eq.(3) são transformadas em integrais de área usando o teorema da divergência de Gauss, em seguida utiliza-se em todas as integrais o teorema do valor médio, obtendo-se a equação discretizada na forma:

$$J_e - J_w + J_n - J_s = L\left[S^\phi\right] + \overline{S}\,\Delta\forall \qquad (4)$$

Onde:

- Os J representam os fluxos totais principais nas faces leste (e), oeste (w), norte (n) e sul (s).
- O operador L [ ] denota uma aproximação numérica do termo no interior dos colchetes e S^ϕ engloba os termos de fluxos difusivos oriundos da transformação de coordenadas não-ortogonais denominadas de fluxos secundários (JS) e são tratados explicitamente no termo fonte.

$$S^\phi = JS_e - JS_w + JS_n - JS_s \qquad (5)$$

- O valor médio da fonte no volume é representado por $\overline{S}$, podendo ser linearizado como $\overline{S} = S_c + S_P\,\phi_P$, com $S_P \le 0$, como proposto por Patankar (1980).

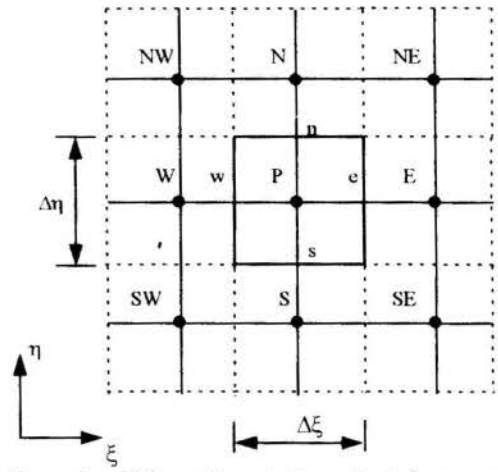


Figura 1 - Volume de controle no domínio computacional.

Para as equações da quantidade de movimento linear, no segundo membro da Eq.(4) acrescenta-se o termo L [P^ϕ] relativo à implementação numérica do gradiente de pressão. Optou-se por avaliar os termos devido à pressão separadamente do termo fonte, já que há necessidade de calcular o campo de pressão na solução de escoamentos.

Para completar a discretização das equações é necessário avaliar os fluxos principais e secundários nas faces dos volumes, já que todas as variáveis estão armazenadas nos pontos nodais no centro dos volumes. Neste trabalho optou-se por um esquema de primeira ordem, o esquema "Power-Law" descrito por Patankar (1980), devido à fundamentação física mais consistente que os outros esquemas. E, também, por um esquema de segunda ordem, o esquema "QUICK", proposto por Leonard (1979), usado para minimizar o efeito da falsa difusão e resolver o problema da atenuação em demasia das variações das variáveis na solução de escoamentos compressíveis com choque, causada pelos esquemas de primeira ordem.

O fluxo principal é avaliado na face em função dos valores obtidos nos pontos nodais, usando os dois tipos de esquemas mencionados, da seguinte forma:

Esquema "Power-Law".

$$J_e = F_e\,\phi_P + \left\{D_e^{11}\,A(|Pe_e|) + Max[0,-F_e]\right\}(\phi_P - \phi_E) \qquad (6)$$

onde: $F = \rho\, U\,\Delta\eta$; $D^{11} = \Gamma Ja\,g^{11}\,\Delta\eta/\Delta\xi$; $Pe = F/D^{11}$

$$A(|Pe|) = Max\left[0\,,\left(1-0{,}1|Pe|\right)^5\right]$$

Esquema "QUICK".

$$J_e = F_e\,\phi_P + D_e^{11}\,A(|Pe_e|)(\phi_P - \phi_E) + Max[0\,,\,F_e/8](\phi_P - \phi_W) - S^{Je} \qquad (7)$$

onde: $A(|Pe|) = 1 + 3|Pe|/4$;

$$S^{Je} = Max[0\,,\,9F_e/8](\phi_P - \phi_E) + Max[0\,,\,-F_e/8](\phi_P - \phi_{EE})$$

Substituindo as Eq.(6) ou (7) e as similares para as outras

faces do volume na Eq. (4) obtém-se a equação de discretização:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \qquad (8)$$

onde: $a_E = D_e^{11} A(|Pe_e|) + Max[0\ ,\ -Flow_e]$;

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_P Ja_P \Delta\xi \Delta\eta$$

$$b = S_c Ja_P \Delta\xi \Delta\eta + L[S^\phi] + S^Q$$

ACOPLAMENTO DENSIDADE-PRESSÃO-VELOCIDADE

A velocidade e a massa específica devem ser corrigidas em função da variação da pressão (P') para satisfazer à conservação da massa. A equação para essa variação (P') é obtida através da equação da continuidade. Está equação é escrita usando os componentes covariantes da velocidade, devido ser mais simples sua implementação.

A equação da quantidade de movimento para o componente covariante da velocidade (u_ξ^*) na face leste (e) do volume pode ser escrita usando a Eq.(8) para os componentes cartesianos u e v da velocidade, avaliados nos pontos nodais P e E, vizinhos à face leste, isto é,

$$\left(u_\xi^*\right)_e = \left(\overline{Hu}_\xi^*\right)_e + \left(\overline{du}_\xi\right)_e \left(P_P^* - P_E^*\right) \qquad (9)$$

onde os valores obtidos nos pontos nodais P e E são:

$$Hu_\xi^* = \frac{x_\xi Hu^* + y_\xi Hv^*}{\left(x_\xi^2 + y_\xi^2\right)^{1/2}} \quad ; \quad du_\xi = \frac{\left(x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi\right)\Delta\eta}{a_P\left(x_\xi^2 + y_\xi^2\right)^{1/2}} \quad ;$$

$$Hu^* = \frac{\sum a_{nb} u_{nb}^* + b^u}{a_P} \quad e \quad Hv^* = \frac{\sum a_{nb} v_{nb}^* + b^v}{a_P}$$

As barras sobre os termos da Eq.(9) denotam que os mesmos são obtidos por interpolação linear dos valores nos pontos nodais vizinhos à face, conforme proposto por Rhie (1981), Peric (1985) e Peric et al. (1988).

Os fluxos de massa calculados com base nas velocidades obtidas através das equações similares a Eq.(9), nos campos de pressão (P) e de massa específica ou densidade (ρ) disponíveis não satisfazem necessariamente à conservação da massa. Há necessidade de corrigir esses fluxos para satisfazer a equação da continuidade, a qual é

$$\left(\rho\delta_\xi u_\xi\right)_e - \left(\rho\delta_\xi u_\xi\right)_w + \left(\rho\varphi_\eta v_\eta\right)_n - \left(\rho\varphi_\eta v_\eta\right)_s = b_{no} \qquad (10)$$

onde: $b_{no} = \left(\rho\varphi_\xi v_\eta\right)_e - \left(\rho\varphi_\xi v_\eta\right)_w + \left(\rho\delta_\eta u_\xi\right)_n - \left(\rho\delta_\eta u_\xi\right)_s$ é o termo fonte obtido devido à não-ortogonalidade e δ_ξ, δ_η, φ_ξ e φ_η são os termos métricos.

Os fluxos de massa devem ser obtidos através da correção tanto do campo de velocidade quanto do campo de massa específica, isto é, os campos de u_ξ, v_η e de ρ podem ser associados aos campos de u_ξ^*, v_η^* e ρ^*, isto é, dos valores mais atualizados durante o processo iterativo, através das equações de correção: $\rho = \rho^* + \rho'$, $u_\xi = u_\xi^* + u'_\xi$ e $v_\eta = v_\eta^* + v'_\eta$. Usando estas equações pode-se linearizar os fluxos de massa da Eq.(10).

$$\left(\rho\delta_\xi u_\xi\right)_e = \left[\delta_\xi\left(\rho^* u_\xi^* + \rho^* u'_\xi + \rho' u_\xi^*\right)\right]_e \qquad (11)$$

onde o termo $\rho'\delta_\xi u'_\xi$ foi desprezado por ser considerado pequeno em relação aos demais.

A correção da velocidade $\left(u'_\xi\right)$ pode ser expressa em termos de P' usando uma forma truncada da Eq.(9).

$$\left(u'_\xi\right)_e = \left(\overline{du}_\xi\right)_e \left(P'_P - P'_E\right) \qquad (12)$$

Na presente formulação utiliza-se a equação, P = P* + P', onde P* é o valor mais atualizado da pressão no processo iterativo e P' é sua correção.

A equação de estado, $\rho = \rho$ (P , T), pode ser linearizada na forma, $\rho = K P + C$, onde $K = \left(\partial\rho/\partial P\right)_T$ e C é uma constante. Então, a correção da massa específica em função de P' é:

$$\rho' = K P' \qquad (13)$$

Os termos de fluxo de massa da equação da continuidade, Eq.(10), requerem os valores da massa específica nas faces. Logo a massa específica no fluxo de massa $\left(\rho\delta_\xi u_\xi\right)_e$, por exemplo, pode ser obtida usando os seus valores nos pontos vizinhos P e E. Então, propõe-se a seguinte interpolação:

$$\rho_e = \beta\left[\rho^{linear}\right] + (1-\beta)\left[\rho^{upwind}\right] \qquad (14)$$

Onde β é o fator de interpolação da massa específica, trata-se de uma constante empírica de valor entre 0 e 1, dependendo do tipo de problema. Para obter a massa específica na face a literatura utiliza a interpolação linear dos valores nos pontos adjacentes (ρ^{linear}), se essa não varia com a pressão. Para o escoamento de fluido compressível usa-se a aproximação "upwind" (ρ^{upwind}), logo a massa específica na face assume o valor igual ao do ponto à montante do escoamento. Esta aproximação normalmente é utilizada para garantir coeficientes positivos nas equações discretizadas e solução estável. Neste trabalho propõe-se uma média ponderada entre os dois métodos com a finalidade de obtenção de soluções estáveis e resultados mais precisos.

A função do fator β é ponderar a influência dos valores conhecidos nos pontos vizinhos à face para avaliar a massa específica nesta posição. Ao estabelecer um valor de β igual ou próximo de um, os valores da massa específica à montante e à jusante do escoamento tornam-se significativos no cálculo. Para solucionar escoamentos transônicos há necessidade de especificar os valores das propriedades no contorno de entrada e, também, no de saída do fluxo, propiciando soluções menos estáveis no cálculo dos valores no interior do domínio, já que elas têm de satisfazer as condições estabelecidas à montante e à jusante do escoamento. À medida que surge instabilidade na solução o valor do fator β é ajustado, a fim de introduzir mais dissipação artificial.

Substituindo-se as Eq.(12) e (13) na (11) e esta na Eq.(10) resulta na equação de correção da pressão, isto é,

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b_c + b_{no} \qquad (15)$$

onde b_c é a equação da continuidade com os valores da velocidade e massa específica mais atualizados.

Neste trabalho utiliza-se o algoritmo de duas equações de correção da pressão, como proposto por Karki e Patankar (1989). Estas equações são obtidas da mesma maneira apresentada para a Eq.(15), a diferença entre as duas está na forma de obter a velocidade (u_ξ^*). A Primeira Equação de Correção da Pressão, que corrige a pressão e a massa específica, avalia a referida velocidade usando a equação da quantidade de movimento, Eq.(9). A Segunda Equação, que corrige o fluxo de massa e a

velocidade, obtém o componente covariante em função dos componentes cartesianos, recém-calculados das soluções das equações da quantidade de movimento.

SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

As equações de conservação da massa, da quantidade de movimento linear e da energia são não lineares e acopladas. O procedimento de linearização e desacoplamento das equações usado neste trabalho é um método de solução seqüencial. O sistema de equações algébricas é solucionado usando-se o algoritmo TDMA linha por linha, proposto por Patankar (1980), e um algoritmo de correção por blocos é utilizado para acelerar a convergência, similar ao proposto por Settari e Aziz (1973).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Escoamento em duto convergente-divergente. O escoamento transônico calculado desenvolve-se através de um duto com a seguinte variação de área na direção axial:

$$A(x) = A_g + (A_e - A_g)\,[1 - (x/5)]^2 \quad , \text{para} \quad x \le 5$$
$$A(x) = A_g + (A_s - A_g)\,[(x-5)/(L-5)]^2 \quad , \text{para} \quad x > 5 \qquad (16)$$

onde L é o comprimento do duto e ($0 \le x \le L$); A_e , A_g , A_s são as áreas das seções de entrada, garganta e saída do duto, respectivamente. Na presente solução numérica, os seguintes valores foram usados: $L = 10$; $A_e = A_s = 2{,}035$ e $A_g = 1$.

As equações de conservação utilizadas para solucionar o problema foram as mesmas obtidas por Shapiro (1953).

Os resultados foram obtidos usando-se 50 volumes igualmente espaçados na direção axial e comparados com as soluções teóricas de Shapiro (1953) e numéricas de Karki e Patankar (1989).

Para as condições de contorno estabeleceu-se na entrada do duto a pressão e temperatura de estagnação, P_o = 1,064 bar e T_o = 305,4 K, e a pressão estática foi extrapolada do interior do domínio computacional. Como valor inicial para o número de Mach na entrada do escoamento, especificou-se M= 0,3. Para o escoamento transônico é necessário especificar uma condição de contorno na seção de saída , logo usou-se a pressão estática igual a 0,852 bar para obter uma situação de choque médio na seção divergente do duto, em seguida testou-se a situação de choque forte com a pressão de 0,636 bar.

Quanto ao critério de convergência, o processo iterativo foi interrompido quando o maior somátorio dos resíduos absolutos das equações de conservação, normalizado pelo inicial, tornou-se menor do que 10^{-7}. Foi assegurado, também, que as variações máximas da velocidade e da pressão tivessem valores menores que 10^{-6} % ao interromper o processo iterativo.

As Fig.(2) e (3) comparam os resultados numéricos do número de Mach com o teórico e com os de Karki e Patankar (1989) para o escoamento com choque médio e forte. Nesses exemplos, a posição do choque foi bem posicionada pela solução numérica e o número de Mach na saída (portanto a perda da pressão de estagnação) resultou em excelente valor. Observa-se que os valores numéricos na região do choque tendem a amenizar a descontinuidade da curva, em conseqüência do esquema "Power-Law" usado na solução que atenua em demasia as variações. O uso do valor β=1 melhora o resultado e aproxima mais os dados numéricos dos teóricos na região do choque, sem contaminar a solução com oscilações irrealísticas pré e pós-choque. A melhora na solução com β=1 foi mais significativa no caso do choque forte. Observa-se nas Fig. (2) e (3) a necessidade do uso de esquema de ordem superior para melhor capturar o choque.

A influência do processo de interpolação da massa específica nas faces dos volumes na solução do escoamento com choque é mostrada nas Fig.(4) e (5). Verifica-se que, ao aumentar o valor de beta a descontinuidade é melhor representada. Ao usar o esquema "Power-Law" e o processo "upwind" (β= 0) na interpolação da massa específica tem-se uma atenuação maior das variações dos dados, gerando um amortecimento muito severo, já que naturalmente os esquemas de primeira ordem limitam as variações, e com a adoção do processo "upwind" esta atenuação tende a ser mais intensa. Ao usar a interpolação linear (β= 1) o amortecimento é amenizado, pois somente o efeito do esquema "Power-Law" permanece.

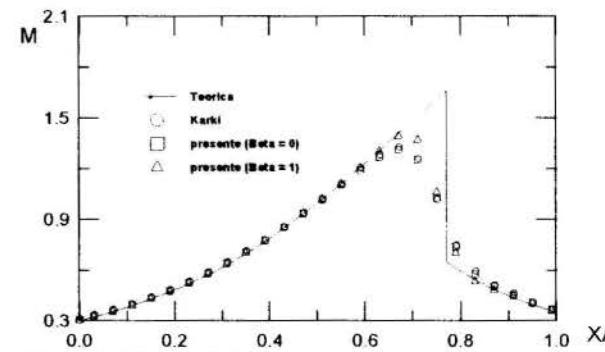


Figura 2 - Número de Mach para a situação de choque médio.

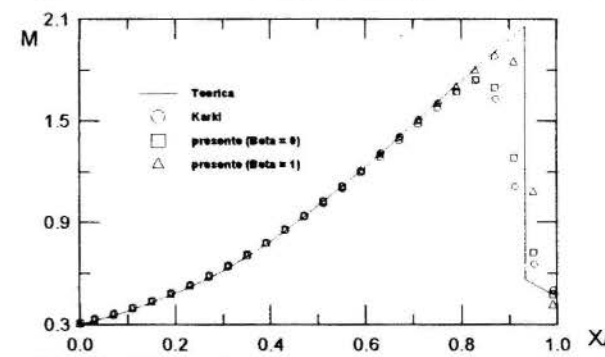


Figura 3 - Número de Mach para a situação de choque forte.

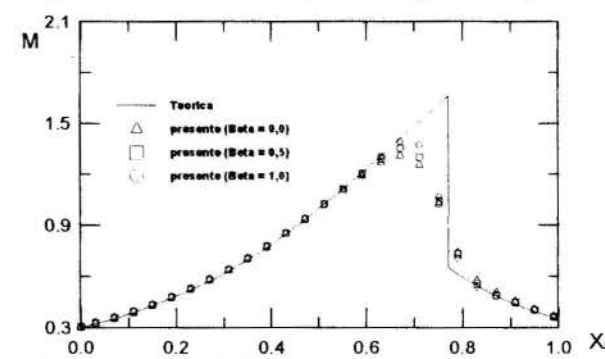


Figura 4 - Influência de beta na situação de choque médio.

Para melhor capturar as variações das propriedades através do choque, investiga-se o desempenho do esquema "QUICK". Os resultados com o uso deste esquema na solução dos escoamentos com choque são mostrados e comparados com o esquema "Power-Law" na Fig.(6). Como o esquema "Power-Law" apresentou melhores resultados para β=1 , este caso foi selecionado para a apresentação. Verifica-se que um esquema de ordem superior fornece melhores valores do que um esquema de primeira ordem, já que não atenua em demasia as variações dos dados na região do choque. Constata-se que, ao aumentar o valor

de beta, a solução fica contaminada por oscilações excessivas nas proximidades da descontinuidade da curva. Estas oscilações irrealísticas pós-choque são mais acentuadas na solução do escoamento com choque forte, resultados não mostrados aqui.

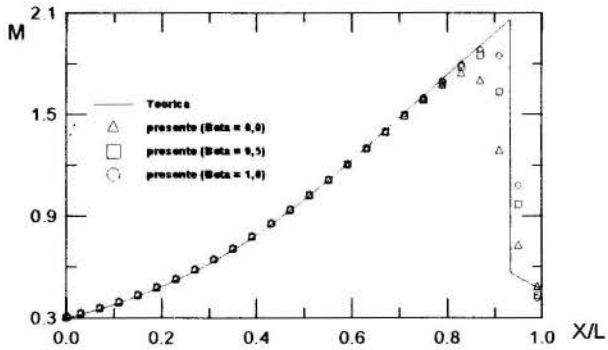


Figura 5 - Influência de beta na situação de choque forte.

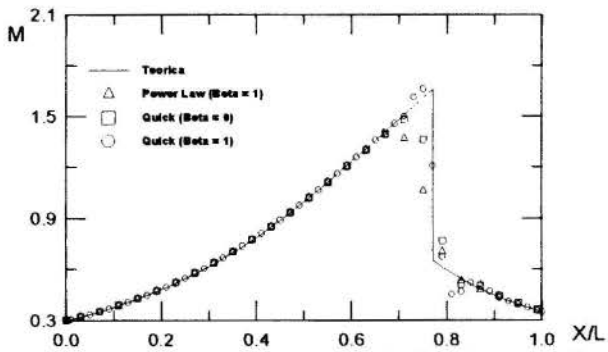


Fig. 6 - Esquemas "Power-Law" e "QUICK" no choque médio.

Escoamento através de canal com obstáculo. O escoamento de fluido compressível (ar), não-viscoso, regime transônico, através de um canal com um obstáculo semicircular na superfície inferior foi escolhido por ter sido utilizado por muitos pesquisadores para verificar a precisão e estabilidade do método numérico empregado, como por exemplo, MacCormack (1982), Ni (1982), Eidelman et al. (1984), Karki e Patankar (1989), Morton e Paisley (1989) e Dermirdzic et al. (1993). A largura do canal é igual ao comprimento do obstáculo (L_b= 1), e demais dimensões são mostradas na Fig.(7). A altura do obstáculo é 10% da distância entre as paredes do canal.

A solução do escoamento não-viscoso foi desenvolvida usando-se as equações de Euler e de estado do gás ideal.

Foi usada a malha de 60x20 volumes. Na direção longitudinal a malha foi refinada na região do obstáculo, e na transversal foi uniformemente espaçada, conforme mostrado na Fig.(8).

O mesmo critério de convergência da solução do problema anterior foi utilizado neste caso.

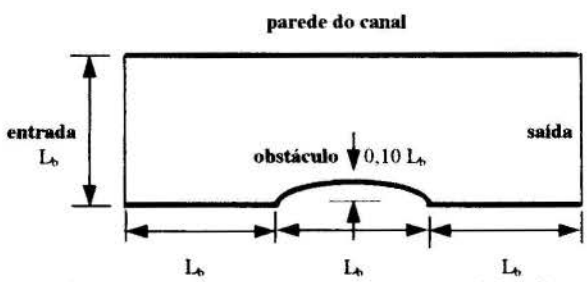


Figura 7 - Canal com obstáculo na superfície inferior.

Estabeleceu-se como condição de contorno na entrada do canal a pressão e temperatura de estagnação (P_o = 1,4926 bar e T_o = 327,32 K), e a pressão estática foi extrapolada do interior do domínio computacional. Na entrada do escoamento, utilizou-se como valor inicial o número de Mach igual a 0,675. Na saída do canal prescreveu-se a pressão estática média de 1,005 bar. Nas superfícies superior e inferior, a condição tangencial e fluxo de massa nulo foram especificados.

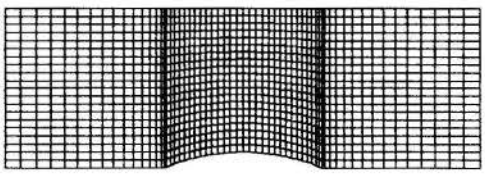


Figura 8 - O domínio físico com a malha de 60x20 volumes.

Os resultados numéricos do número de Mach ao longo das superfícies superior e inferior do canal obtidos por Eidelman et al. (1984), os de Karki e Patankar (1989) e os dados pelo presente trabalho são mostrados e comparados na Fig.(9). Uma região supersônica surge no canal, a qual é finalizada por um choque normal. O método proposto foi capaz de predizer o choque estendido em uma região com cerca de 5,7% (β= 0) e 4,5% (β= 1) do comprimento do canal, resultado melhor do que o de Karki e Patankar (1989) que obtiveram 10%. O número de Mach máximo imediatamente antes do choque e sua localização, obtidos pelo presente método ("Power-Law") foram M= 1,26 e X= 0,572 (β= 0) e M= 1,38 e X= 0,584 (β= 1), respectivamente. Eidelman et al. (1984), Karki e Patankar (1989) e Dermirdzic et al. (1993) obtiveram M= 1,20 ; 1,10 e 1,43 e X= 0,546 ; 0,551 e 0,567, respectivamente. Todos estes usaram esquemas de primeira ordem, porém Dermirdzic et al. utilizaram uma malha mais refinada (224 x 56 volumes). Ni (1982) e Morton e Paisley (1989) obtiveram a mesma posição e número de Mach antes do choque que Dermirdzic et al.

A influência do tipo de interpolação da massa específica (β) só foi significativa na vizinhança da onda de choque. Tem-se duas causas de difusão numérica na solução do escoamento transônico, uma devido ao uso do esquema "Power-Law" e a outra da utilização do processo "upwind" (β= 0) para obter a massa específica nas faces dos volumes, isto é, esquema "upwind" para obter os termos convectivos das equações da quantidade de movimento nas faces e a massa específica na equação da continuidade. Essa difusão numérica produz excessiva dissipação na região do choque. Estes efeitos estão provavelmente produzindo mais dissipação do que seria necessário para estabilizar a solução próximo ao choque. Essa difusão pode ser amenizada através do valor de β ou com um esquema de segunda ordem, por exemplo o esquema "QUICK". Porém, o uso de um esquema de segunda ordem, tais como de Gudonov, Eidelman et al. (1984), e MacCormack (1982) resultaram em um choque mais fraco que o obtido neste trabalho com o esquema "Power-Law" e β= 1, obtendo número de Mach máximo de aproximadamente 1,32. A Fig.(10) mostra os resultados obtidos pelo presente método usando o esquema "QUICK" (segunda ordem), comparando com os fornecidos pelo esquema "Power-Law" (primeira ordem). Selecionou-se para cada esquema o melhor fator de interpolação β, isto é, especificou-se β= 0 para o esquema "QUICK" e β= 1 para o "Power-Law". Com o uso do esquema "QUICK", verifica-se que surge um choque mais forte e mais nítido, estendendo-se em uma região menor, cerca de 4,1% do comprimento do canal, em relação à solução com o esquema "Power-Law". O número de Mach máximo foi de 1,48, localizado a X= 0,608. Nas regiões distantes do choque os resultados obtidos com diferentes esquemas apresentaram boa concordância entre eles. Note-se, no entanto, uma pequena oscilação na solução obtida com o esquema "QUICK" na região de saída.

As isolinhas para o número de Mach são mostradas na Fig.(11). Um choque normal surge na região de saída do obstá-

culo, como observado na figura pela aproximação das isolinhas, indicando grandes variações do número de Mach ao longo de uma estreita região.

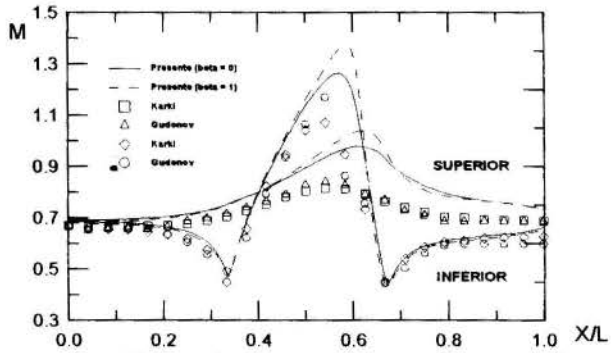


Figura 9 - Número de Mach para o escoamento transônico.

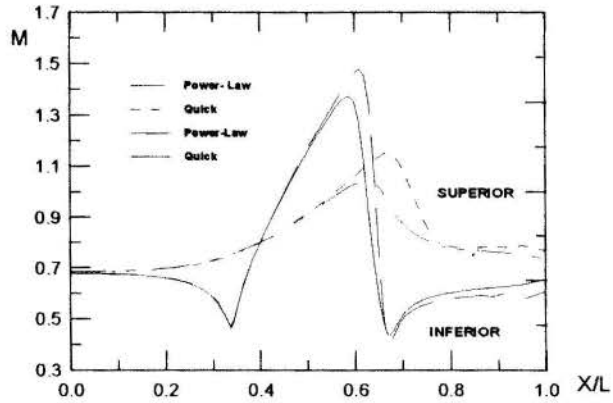


Figura 10 - Esquemas "Power-Law" e "QUICK".

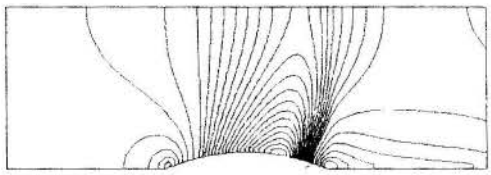


Figura 11 - Isolinhas do número de Mach para M = 0,5 , (0,05) , 0,8 e 0,8 , (0,025) , 1,25

CONCLUSÕES

Na solução numérica de escoamentos de fluidos em regime transônico com onda de choque propôs-se um método de interpolação da massa específica nas faces dos volumes, como uma média ponderada entre a interpolação linear e a aproximação "upwind". Amenizou-se a excessiva dissipação do choque, causada pela difusão artificial. O algoritmo proposto obteve resultados mais precisos e melhores taxas de convergência.

REFERÊNCIAS

Dermirdzic, I; Lilek, Z. e Peric, M., 1993,"A Collocated Finite Volume Method for Predicting Flows at All Speeds", Int. J. Num. Methods in Fluids, vol. 16, pp. 1029-1050.

Eidelman, S ; Colella, A.D. e Shreeve, R.P. , 1984, "Application of the Gudonov Method and its Second-Order Extension to Cascade Flow Modeling", AIAA Journal, vol. 22, pp. 1609-1615.

Leonard, B.P., 1979, "A Stable and Accurate Convection Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", Com. Methods in Appl. Mechanics and Engineering, vol. 19, pp. 59-98.

Karki, K.C. e Patankar, S.V. , 1989, "Pressure Based Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speed in Arbitrary Configurations", AIAA Journal, vol. 27, nº 9, pp. 1167-1174.

MacCormack, R.W., 1982, "A Numerical Method for Solving the Equations of Compressible Viscous Flows", AIAA Journal, vol.20, pp. 1275-1281.

Maliska, C.R. e Silva, A.F.C., 1989, " A Boundary-Fitted Finite Volume Method for the Solution of Compressible and/or Incompressible Fluid Flows using Both Velocity and Density Corrections", 7th International Conference on Finite Element Methods in Flow Problems, pp. 405-412, Huntsville, Alabama.

Marchi, C.H.; Maliska, C.R. e Silva, A.F.C., 1990, "A Boundary-Fitted Numerical Method for the Solution of Three Dimensional All Speed Flows Using Co-Located Variables", III ENCIT, pp. 351-356.

Marchi, C.H. e Maliska, C.R., 1994, "A Nonorthogonal Finite-Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-Located Variables", Num. Heat Transfer, Part B, vol. 26, pp. 293-311.

Morton, K.W. e Paisley, M.F., 1989, "A Finite Volume Scheme with Shock Fitting for Steady Euler Equations", J. Computational Physics, vol. 80, pp. 168-203.

Ni, R.H., 1982, "A Multiple Grid Scheme for Solving the Euler Equations", AIAA Journal, vol. 28, pp. 1565-1571.

Patankar, S.V., 1980, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, USA.

Peric, M., 1985, "A Finite Volume Method for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts", Ph.D. thesis, University of London, UK.

Peric, M. ; Kessler, R., e Scheuerer, G., 1988,"Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Colocated Grids", Computers & Fluids, vol. 16, nº 4, pp. 389-403,.

Rhie, C.M., 1981, "A Numerical Study of the Flow Past an Isolated Airfoil with Separation", Ph.D. Thesis, Dept. of Mechanical and Industrial Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA.

Settari e Aziz, 1973, "A Generalization of the Additive Correction Methods for the Iterative Solution of Matrix Equations", SIAM J. Num. Analysis, vol. IV, pp. 506.

Shapiro, A.H., 1953, "The Dynamisc and Thermodynamics of Compressible Fluid Flow", vol. I, Ronald, New York, USA.

Silva, A.F.C. e Maliska, C.R., 1987, "Avaliação no Limite Incompressível de uma Formulação para Qualquer Regime de Escoamento", IX COBEM, pp. 241-244.

Silva, A.F.C. e Maliska, C.R., 1988, "Uma Formulação Segregada em Volume Finitos para Escoamentos Incompressíveis e/ou Compressíveis em Coordenadas Generalizadas", II ENCIT, pp. 11-14.

ABSTRACT

This paper presents an algorithm for the numerical solution all speed flows. It's based on the finite volume, with a co-located mesh. Transonic flows with chock are well predicted with both first and second-order schemes. A interpolation method of the face density is used to reduce the excessive artificial diffusion near the chock.

Parallel Solution of Free Surface Flows

José A. Cuminato Antonio Castelo Filho Murilo F.Tomé
ICMSC-USP, P. O. Box 668 - 13560-970, São Carlos, S.P., Brasil
Maurílio Boaventura
IBILCE-UNESP, P. O. Box 136 - 15054-000 - S. J. do Rio Preto, S.P., Brasil

Abstract

A parallel technique based on domain decomposition for solving the Navier-Stokes equations in two dimensions with free surfaces is described. It is based on the code by Tome & McKee [1994] and Tome [1993], which in turn is based on the SMAC method by Amsden & Harlow [1971], which solves the Navier-Stokes equations in three steps: The momentum equation and Poisson solvers and particle movement. These equations are discretized by explicit and 5-point finite diferences, respectively. The parallelization is performed by splitting the computation domain into vertical strips and assigning each of these to a processor. All the computation can then be performed using nearest neighbour communication. We present run tests comparing the performance of the parallel with the serial code, and discuss load balancing strategies for improving its performance.

Introduction

The marker-and-cell (MAC) method, introduced by Harlow and Welch [1965] is particularly suited for the modeling of fluid flows with free surfaces. One of its important features is the use of virtual particles which move from one cell to the next as a function of the flow velocities. If a cell contains a number of particles it is considered to contain fluid, providing the localization of the free surface. It is thus, a special feature of the MAC method that the domain is split into a number of cells which are denoted to be either empty, full, surface or boundary cells, and one has to keep track of these cells as time evolves.

Amsden and Harlow [1971] developed a simplified MAC method (SMAC) where the calculation cycle is split into two parts: a provisional velocity field calculation followed by a velocity update using a potential function which is the solution of Poisson's equation and ensures mass conservation.

Tome and McKee [1994] developed this technique further by adding a number of specially designed devices to deal with general domains and multiple inlets/outlets. They called it GENSMAC. This code has been successfully used to simulate different types of 2D free surface flows, such as: jet filling of complex shaped cavities, penstock head-gate closure, jet buckling and die swell problems, see Tomé & McKee [1993]. The generalization of their code to cope with 3D problems is not feasible on a serial computer due to the staggering amount of particles needed to represent the 3D flow properly. Particle representation of the fluid makes it too expensive to obtain the fluid boundaries for visualization as we have to do a Delaunay triagularization which is very costly. Another difficulty GENSMAC faces is in coping with slow flow of very viscous fluids because in this case stability restrictions make the time step very small, leading to unrealistic run times.

In this work we present modifications to the original SMAC technique implemented in GENSMAC and describe a parallel algorithm based on domain decomposition for the implementation of the SMAC method which does present the same difficulties in coping with the three dimension problem. At this moment we have implemented the 2D version only. Efficency tests relating to load balance and communication will be presented.

The SMAC Method

The SMAC method is based on a staggered grid finite differences discretization of the equations arising from the following procedure used to solve the Navier-Stokes equations:

Assume that at time t_0 the velocity field $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_0)$ is given. Calculate $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t), t = t_0 + \Delta t$ from the following:

1. Let $\tilde{p}(\mathbf{x}, t_0)$ be an arbitrary pressure field satisfying the correct pressure conditions on the free surface.
2. Calculate the intermediary velocity field $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ from

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = -\frac{\partial u^2}{\partial x} - \frac{\partial uv}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} + \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{Fr^2} g_x \tag{1}$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = -\frac{\partial uv}{\partial x} - \frac{\partial v^2}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} + \frac{1}{Re}\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{Fr^2} g_y \tag{2}$$

where $Re = UL/\nu$ and $Fr = U/\sqrt{Lg}$ with U and L typical velocity and length scales, g gravity and ν viscosity.

3. Solve the Poisson's equation

$$\nabla^2 \psi = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \qquad in \quad \Omega$$

4. Update the velocities and pressure from:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x},t) = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x},t) - \nabla\psi(\mathbf{x},t) \tag{3}$$

$$p(\mathbf{x},t) = \tilde{p}(\mathbf{x},t) + \psi(\mathbf{x},t)/\Delta t \tag{4}$$

5. Update the particles position by solving the ODE's:

$$\frac{dx}{dt} = u \qquad \frac{dy}{dt} = v. \tag{5}$$

A number of boundary conditions can be applied at the rigid boundaries, namely: no-slip, free-slip, prescribed inflow, prescribed outflow and continuative outflow. At the free surface the usual free surface stress free conditions apply:

$$p - \frac{2}{Re}\left[n_x n_x \frac{\partial u}{\partial x} + n_x n_y \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) + n_y n_y \frac{\partial v}{\partial y}\right] = 0 \tag{6}$$

$$n_x m_y \frac{\partial u}{\partial x} + n_x m_y \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) + n_y m_y \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{7}$$

where $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ is the outward unit normal vector to the surface and $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$ is the tangential vector. For the Poisson equation the boundary conditions are of mixed type, at the free surface a homogeneous Dirichlet boundary condition applies and at the rigid boundary the boundary condition is of Neuman type.

The implementation of the SMAC method effected in GENSMAC constitutes then of three main parts:

1. The velocity solver based on explicit finite differences

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{u}^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j} - u^n_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{p}_{i,j} - \tilde{p}_{i+1,j}}{\Delta x} \\
&+ \frac{u^n_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} v^n_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} - u^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} v^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \\
&+ \frac{u^n_{i+\frac{1}{2},j} u^n_{i-\frac{1}{2},j} - u^n_{i+\frac{3}{2},j} u^n_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} \\
&+ \frac{1}{Re}\left[\frac{u^n_{i+\frac{3}{2},j} - 2u^n_{i+\frac{1}{2},j} + u^n_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta^2 x}\right. \\
&+ \left.\frac{u^n_{i,j+\frac{3}{2}} - 2u^n_{i,j+\frac{1}{2}} + u^n_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta^2 y}\right] + \frac{1}{Fr^2} g_x
\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{v}^{n+1}_{i+\frac{1}{2},j} - v^n_{i+\frac{1}{2},j}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{p}_{i,j} - \tilde{p}_{i,j+1}}{\Delta y} \\
&+ \frac{u^n_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} v^n_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - u^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} v^n_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}}{\Delta x} \\
&+ \frac{v^n_{i,j+\frac{1}{2}} v^n_{i,j-\frac{1}{2}} - v^n_{i,j+\frac{3}{2}} v^n_{i,j+\frac{1}{2}}}{\Delta y} \\
&+ \frac{1}{Re}\left[\frac{v^n_{i+\frac{3}{2},j} - 2v^n_{i+\frac{1}{2},j} + v^n_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta^2 x}\right. \\
&+ \left.\frac{v^n_{i,j+\frac{3}{2}} - 2v^n_{i,j+\frac{1}{2}} + v^n_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta^2 y}\right] + \frac{1}{Fr^2} g_y
\end{aligned} \tag{9}$$

2. The Poisson Solver Based on 5-point FD

$$4\psi_{i,j} - \psi_{i+1,j} - \psi_{i-1,j} - \psi_{i,j+1} - \psi_{i,j-1} = -h^2 D_{i,j}$$

3. Particle Movement

$$x^{n+1} = x^n + u\delta t$$

$$y^{n+1} = y^n + v\delta t$$

Parallel Solver

At a given time t the solution domain will resemble the one depicted in figure 1 below, where S denotes the cells forming the free surface, B denotes the rigid boundary and F denotes the fluid. The algorithm described in steps 1 and 2 is to be applied to the cells marked with F. Step 3 applied also to cells marked with S and B. On the cells marked with S the velocities are updated using the free surface stress free conditions (6-7). On the rigid boundary, inlet and outlet the velocities are calculated from the appropriate boundary conditions applicable to each case.

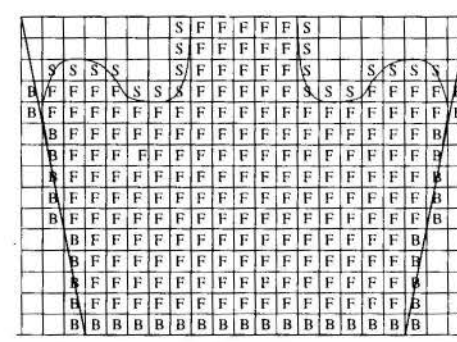


Figure 1: Domain Ω and types of Cells in GENSMAC

The region containing all the cells is split into a number of vertical panels. These panels are then assigned to each of the available processors, which goes on to apply the velocity solver to its grid points which are full cells, see figure 2. For the explicit finite differences scheme this step presents no difficulties for the parallel algorithm, but, as mentioned in the introduction, for some problems, stability constraints make the time step extremely small, so that an implicit method is in order. Figure 2 shows the stencil for the momentum equations.

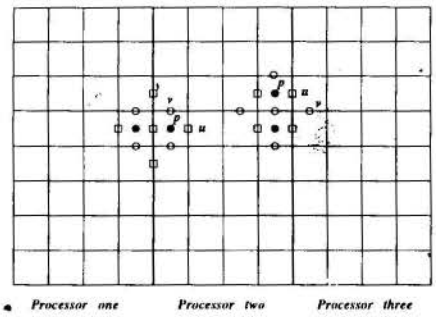


Figure 2: Stencil for the momentum equations

After having calculated the tilde velocities from equations (8-9) each processor communicates the first and last columns of both u and v, see figure 2, to the right and left neighbour processors, respectively. Obviously the first and last processor communicates, only the last and the first colummns, respectively. The next step is the solution of Poisson's equation through the 5 point finite difference scheme of step 2. This step is effected using the same processor topology used for the momentum equations. We use a parallel implementation of the conjugate gradiente method presented in (Cunha [1992,1992a]) and distributed in the package Parallel Iterative Methods (PIM), see (Cunha & Hopkins [1993]). PIM implements all the code necessary for the iteration of the CG method, apart from the routines for matrix-vector products and inner products, which are supplied by the user. In this context this is one of the major difficulties, because the matrix-vector products are quite involved and requires careful coding. One step of the conjugate gradient solver requires the computation of the matrix-vector product $y = Ax$, where for a grid point (i,j) the corresponding $y_{i,j}$ is calculated from

$$y_{ij} = \alpha_{ij}x_{ij} + \beta_{ij}x_{i+1,j} + \gamma_{ij}x_{i-1,j} + \delta_{ij}x_{i,j+1} + \epsilon_{ij}x_{i,j-1} \tag{10}$$

and $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ and ϵ are the coefficients corresponding to the center, north, south, east and west locations, respectively. These coefficients are derived from the PDE and boundary conditions.

The main difficulty in performing this matrix-vector product is associated with the domain being irregular. This is done in such a way that only points falling inside the region Ω will be included in the calculations. To achieve this, indirect addressing has to be used in order to cope with the contribution of the farthest points (east and west in our case because we are numbering the unknowns by columns) and to minimize communication, as we do not wish to communicate the coefficients of points which are not going to be used to form the product. For points inside Ω with neighbours not in Ω, the corresponding coefficient is set to zero. To implement the correct boundary conditions it is necessary at this stage to modify the coefficients and/or the right-hand side vector as appropriate. Note that the coefficients are formed only once, and are kept fixed during the iterations of the iterative method. This arrangement permits the use of non-uniform meshes. The generality of the geometry makes the next neighbour communication pattern much more involved than the case of a square region, because the length and positions of the vectors to be exchanged depend now on the geometry.

The parallel implementation of the particle movement is done likewise. Each processor having upgraded the velocity and pressure fields applies the ODE (5) to find the position of its particles at that time. Particle movement across processor boundaries will be necessary and will only involve next neighbour communication. The position of the fluid is updated with each processor communicating the possible particles which are to be moved across the boundaries. At the end of a computing cycle all processors hold the correct information for performing the next step. The calculation cycle can be summarized by the algorithm:

- Call REFLAG, this routine relabels the cells according to movement of the particles.
- Comunicate the cells flagging and the velocities u and v
- Call SUREMP, TANOUT, BCOND, these routines apply the boundary conditions on the free surface, SUREMP applies equation (6), TANOUT applies equation (7) and BCOND applies the boundary conditions on the rigid boundary.
- Call PSEUDPRESS, this routine calculates the pressure.
- Communicate the pressure.
- Calculate the tilde velocities.
- Communicate the tilde velocities.
- Apply the conjugate gradiente solver to calculate ψ.
- Communicate ψ.
- Update the velocity field and the pressure field equations (3-4).
- Communicate the updated velocities.
- Call SUREMP, TANOUT, BCOND, again to update the velocities on the boundary using the newly calculated velocity filed.
- Communicate the updated boundary velocities.
- Call PACKIN, this moves the particles to the new positions.
- Communicate the cells flagging.

The routines that update the velocities on the boundary need to comunicate the velocities on the boundary only instead of the whole line.

Test Problems

The serial code has been thoroughly tested throughout years of use, including validation against experimental tests. Several problems has been solved using it including jet filling of complex shapes, see Tome[1993]. We tested our code against two test problems as described below.

Problem 1: Droplet Into a Circular Cavity

This example shows the motion of a square block of fluid under the force of gravity as it falls into a circular cavity. No-slip boundary conditions are applied at the cavity wall while free-slip conditions are applied at the other walls. This example was considered by Viecelli [1969], with free-slip conditions imposed on the cavity wall. In this example we used the diffusion coefficient ($1/Re = 0.15$) and the gravitational force in the y-direction was ($g_y/Fr^2 = -1.0$). The distribution of particles per cell is taken as 16 particles in each cell. Figure 3 displays the particle configuration at different time intervals.

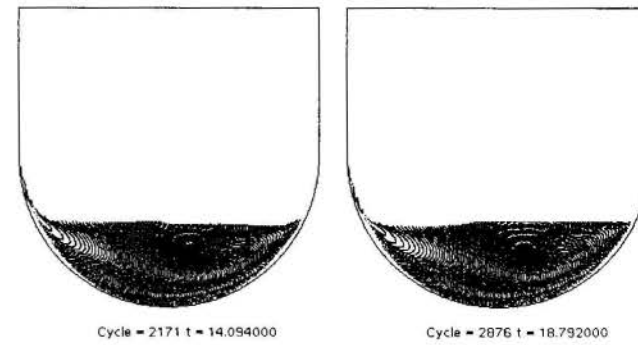
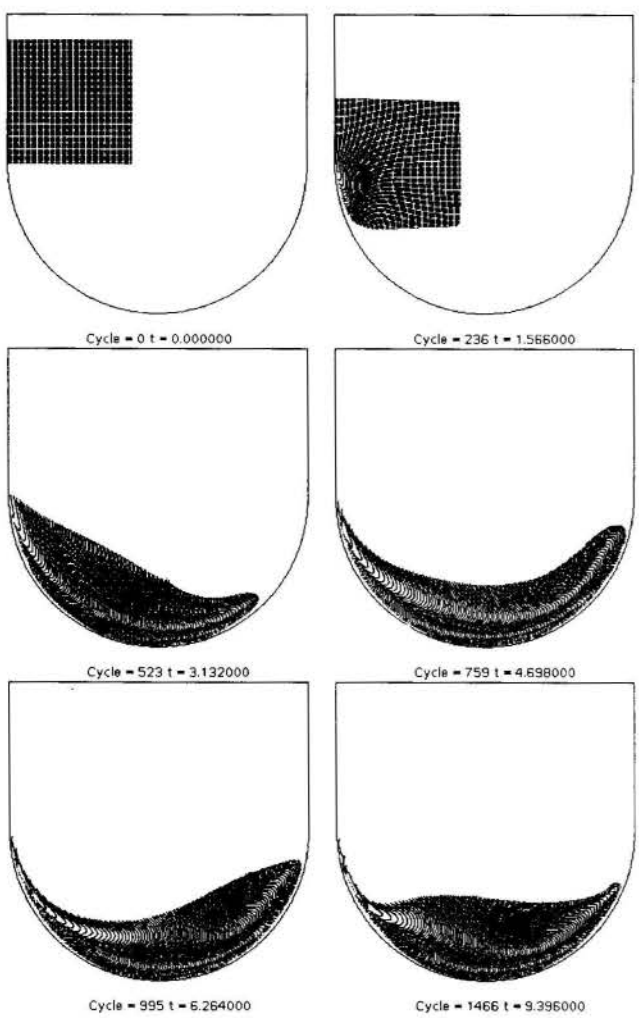
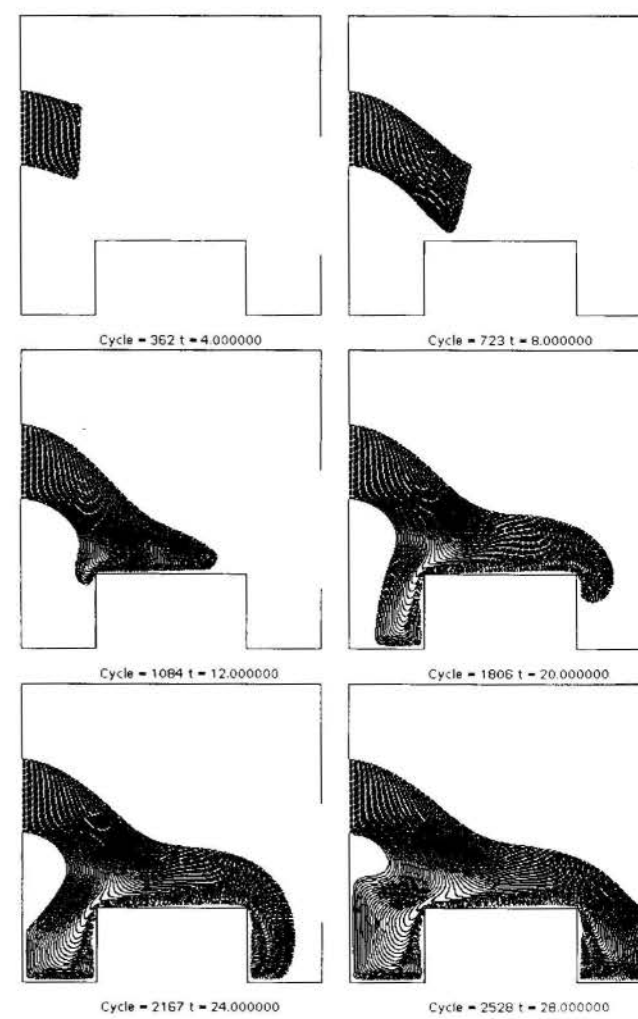


Figure 3: Particle plots for the droplet problem at different times.

Problem 2: Waterfall Onto a Step

This example simulates the flow of water onto a step in the presence of inflow and outflow boundaries. Fluid enters an empty system starting at $t = 0$, falls under the influence of gravity onto a step, and proceeds out a continuative outflow boundary. The conditions on the walls of the container and on the step are no-slip boundary conditions. The plots display the particle configuration for different times. The parameters used with this example are ($1/Re = 1.0$), $g_y/Fr^2 = -0.25$).





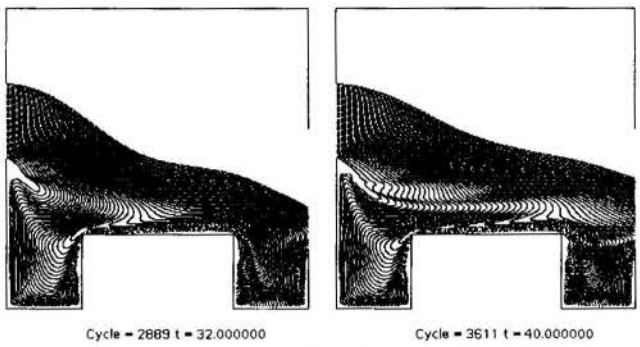


Figure 4: Particle plots for the waterfall problem at different times.

Performance of the Parallel Code

We applied the parallel code to solve the same two problems described in the previous section.

Table 1 below displays the wall clock times taken to run the code for one processor T_s, four processors T_4 and eight processors T_8 for different sized problems. The number under the heading *neq* represents the number of cells containing fluid. As could be antecipated from a carefull analysis of the parallel algorithm the performance of the code degrades with increasing number of processors, for a fixed problem size. This is because in keeping the problem size fixed and increasing the number of processors the number of equations each processor is assigned decreases and the amount of communication, on the other hand, increases, so that the ratio computation/communication tends to zero. However, the total time taken to run the code gets smaller, as a proportion of the serial time, as the size of the problem increases. For a problem size of 556 equations the time taken on 4 processors is about half that of the serial code, but the performance is not much better with 8 processors, that is, 556 equations is not a big enough problem to be solved with 8 processors. This presents a limitation of the parallel code which is related to the nature of the free surface transient problem. Note that, in this example, the amount of fluid is constant throughout the simulation so if we increase the number of processors beyond a certain threshold the performance of the code does not respond because the size of the problem being solved in each processor is too small to make up for the communication.

Table 1: Wall-clock times in seconds

neq	$T_s(s)$	$T_4(s)$	$T_8(s)$
144	56.55	60.82	66.29
196	168.75	147.88	162.66
246	311.49	249.05	241.98
271	446.00	328.26	286.09
385	872.15	507.55	443.27
450	1185.9	623.78	510.77
556	1953.7	949.43	707.47

Table 2 displays the efficiency of the code with the increasing problem size. The expression $E = \frac{T_s}{pT_p}$ represents how efficient the parallel algorithm is in utilizing processor time. Note that if the time taken by the p processors were $\frac{1}{p}$ of that of the sequential code then E would have been 1. In this case the efficiency of the parallel code is the best one can hope for. Observing the last column of table 2 we see that the performance of the code for 8 processors is not particularly good, as already commented on this issue before. However, one should note that the efficiency is growing with problem size, and this is very encouraging in the sense that we can hope solving really large problems with the right number of processors. As already mentioned this problem does not present a good example where the performance of the code is best, because of the fixed amount of fluid in the simulation.

Table 3 shows the same data as table 2 for the waterfall problem. Here despite of the problem having an inflow and outflow, meaning that the number of particles vary during the run, the performance of the code as the number of processes increase degrades.

Table 2: Efficiency for the droplet problem

neq	$\frac{T_s}{2T_2}$	$\frac{T_s}{4T_4}$	$\frac{T_s}{6T_6}$	$\frac{T_s}{8T_8}$
144	0.57	0.23	0.14	0.11
196	0.67	0.28	0.19	0.13
246	0.71	0.31	0.24	0.16
271	0.77	0.34	0.25	0.19
385	0.85	0.42	0.31	0.25
450	0.88	0.48	0.37	0.29
556	0.93	0.51	0.41	0.35

Again this is mainly due to the fact that the number of equations is not large enough to be worth the distribuition. In fact at the start of the process the number of equations is very small. The average number of equations is smaller in this problem than it was in problem 1. But again as can be deduced from the entries in table 3 the efficiency is growing with the number of processes as the size of the problem increases. This is particularly encouraging because we can hope that in the 3D problem the efficiency is going to be much better because then the amount of work is going to be very large, and we shall be able to solve really large problems using a cluster of workstations.

Table 3: Efficiency for the waterfall problem

neq	$\frac{T_s}{2T_2}$	$\frac{T_s}{4T_4}$	$\frac{T_s}{6T_6}$	$\frac{T_s}{8T_8}$
173	0.43	0.20	0.11	0.08
246	0.47	0.25	0.13	0.10
346	0.49	0.30	0.17	0.12
414	0.52	0.32	0.19	0.13
500	0.57	0.37	0.22	0.16
635	0.60	0.42	0.25	0.18
789	0.61	0.48	0.29	0.21
913	0.63	0.53	0.32	0.23
1339	0.66	0.57	0.37	0.29
1625	0.69	0.63	0.44	0.33
2812	0.79	0.71	0.60	0.45

Load Balance

The load balance presents a major difficulty for problems with free surfaces, because the domain changes as time evolves. This is specially so for the type of problems we are dealing with in this work, as the free surface can take arbitrary geometries and can change shape dramatically with time. For instance, in a problem with inflow, in the initial phase the region occupied by the fluid is small, and so is the computation involved, so that it is not worth distributing it. As the domain grows more work needs to be performed and it is then distributed amongst the available processors. The strategy we adopted in the parallel version of GENSMAC is a follows:

- As the code stands at the moment the domain is split into a number of panels each of which is assigned to a processor. If this panel contains no fluid the processor is idle up to the moment fluid arrives at it. This can take a considerable number of time steps, but when the amount of fluid is small the number of equations to be solved is also small, and it not worth distributing it. This strategy is not as bad as it may look at first, because processors with no fluid have no activity so that they act as they were asleep, and are weakened up only when fluid arrives at them. From the point of view of the user the code behaves as if one processor is added at the time when it is needed. Of course when fluid first arrives at one processor and ocupies a small volume the load is unbalanced for some time until each processor holds comparable amounts of fluid. To balance it would envolve redistributing the work amongst the available processors with a considerable boost in the communication.

Conclusion

A parallel implementation of the SMAC method is presented. This implementation is based on the code GENSMAC which has been successfully tested with a variety of problems. The parallel code is based on domain decomposition and is implemented using PVM due to its being a public domain software and permitting the use of a cluster of workstations as a parallel computer, which are inexpensive and readly available. The tests showed that the parallel implementation can harness the power of the cluster cutting running times to at least half that of the serial code. However, as the tests show, one cannot hope to increase the number of processes indefinetly, for a fixed sized problem. This is a characteristic inherent to the type of problem we are dealing with, where the solution domain varies with time, starting from a very small region and growing as time evolves. At this moment the code is being fine tunned, so that we hope to report on even better performance in the near future. The real test will be for the three dimension problems where the serial code will not be feasible.

Acknowledgement

This work is part of an on-going project supported by FAPESP and CNPq under grants 94/6019-2 and 523141/94-7, respectively. The author Maurílio Boaventura is supported by CAPES under a Ph. D. grant. The code is implemented in FORTRAN 77 using PVM for message passing and the run tests were performed on a SPARC 20 with two processors.

References

[1] Amsden, A.A.; Harlow, F.H. - The SMAC method: A numerical technique for calculating incompressible fluid flows - Los Alamos Scientific Laboratory, Report LA-4370 - [1971]

[2] Cunha, R.D. - A Study of Iterative Methods for the Solution of Systems of Linear Equations on Transputer Networks - Ph. D. Thesis - University of Kent at Canterbury U.K. - [1992]

[3] Cunha, R.D.; Hopkins, T. - The parallel solution of linear equations using iterative methods on transputer networks - Technical Report 16/92 - University of Kent at Canterbury U.K. - [1992a]

[4] Cunha, R.D.; Hopkins, T. - PIM 1.1 - The parallel iterative package for systems of linear equation - User's guide - Technical Report - University of Kent at Canterbury U.K. - [1993]

[5] Harlow, F.; Welch, J.E. - Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surfaces - Phys. Fluids **8** pp. 2182-2189 [1965]

[6] Tome, M.F.; McKee, S. - GENSMAC: A computational marker and cell method for free surface flows in general domains - J. Comp. Physics **110** pp. 171-186 [1994]

[7] Tome, M. F. - GENSMAC: A Multiple Free Surface Fluid Flow Solver - Ph. D. Thesis University of Strathclyde - Glasgow - Scotland [1993]

[8] Viecelli, J. A. - A Method for including arbitrary external boundaries in the MAC incompressible fluid computing technique - J. Comp. Phys. **4** pp. 543-551 [1969]

Address for correspondence:

J.A. Cuminato
Department of Computer Sciences
ICMSC - USP - P. O. Box 668
13560-970 São Carlos - SP
Brazil

ABCM

ESTUDO DE ESQUEMAS DE DISCRETIZAÇÃO DOS TERMOS CONVECTIVOS EM ESCOAMENTOS FORTEMENTE NÃO-ESTACIONÁRIOS

Marcos Vinicius Bortolus
Departamento de Engenharia Mecânica
UFMG - Universidade Federal de Minas Gerais
31270-901 - Belo Horizonte - MG - Brasil

RESUMO

O objetivo deste trabalho é estudar esquemas de discretização de termos convectivos que possam ser aplicados à simulação direta do transporte passivo de energia em escoamentos turbulentos com recirculação. Oscilações não-físicas no campo de temperatura foram encontradas em testes iniciais com o esquema QUICK de Leonard. Aqui, apresenta-se os resultados de tentativas de se limitar estas oscilações com os esquemas SMART de Gaskell e Lau, ULTIMATE de Leonard e NOTABLE de Pascau e Pérez.

INTRODUÇÃO

Este trabalho faz parte de uma pesquisa sobre a simulação numérica do transporte passivo de energia em escoamentos turbulentos com recirculação. Pretende-se com esta pesquisa melhorar a compreesão de mecanismos físicos que ligam os campos dinâmicos e térmicos, obter dados estatísticos sobre as diversas variáveis turbulentas e, assim, aperfeiçoar os modelos de turbulência utilizados a nível industrial, principalmente no que diz respeito às predições de transferências térmicas parietais nestes escoamentos. Atualmente, com o desenvolvimento dos supercomputadores, as simulações numéricas se apresentam como ferramentas importantes para a compreensão de escoamentos turbulentos, principalmente em regiões próximas de superfícies sólidas devido às dificuldades práticas encontradas no caso das técnicas experimentais.

O programa de simulação utilizado neste trabalho é o CUTEFLOWS (Computing Unsteady Three Dimensional Flows) que foi desenvolvido por Humphrey et al.(vide Schuler et al.,1991) na Universidade de Berkeley. Este programa foi aplicado ao caso do escoamento incompressível em torno de um degrau (backward facing step flow) seguindo a mesma geometria e condições de contorno das experiências realizadas por Vogel e Eaton(1985) que, no que diz respeito ao aspecto térmico, estão muito bem documentadas.

Os primeiros testes com este programa mostraram que os perfis de temperatura, devido a oscilações numéricas, apresentavam níveis abaixo ("undershoots") e acima ("undershoots") de níveis físicos. Este problema se deve ao esquema numérico para os termos convectivos QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) de Leonard(1979) utilizado no CUTEFLOWS e ele aparece quando se utiliza aproximações de ordem elevada, como o QUICK, quando os termos convectivos são dominantes em regiões onde existem fortes gradientes(Maliska, 1995). Assim, apesar do esquema QUICK apresentar características atrativas no que diz respeito à difusão numérica, estabilidade (no que se refere à convergência do algoritmo - "upwinded") e simplicidade de algoritmo, existe a possibilidade do aparecimento de oscilações espúrias nos casos em que a convecção domina como apontado pelo próprio Leonard-(1988a).

Smith e Hutton(1982), após estudar os resultados de diversos autores concluiram que o modelamento da convecção é a arte do compromisso entre os erros de difusão e de oscilação numéricos. Geralmente, para evitar os problemas de oscilação existem dois métodos:

- i) combinação local de um esquema de ordem elevada, mas dispersivo (provocando oscilações) e de um esquema de ordem inferior, mas difusivo. Como exemplos, podemos citar o esquema FCT (Flux Corrected Transport) de Boris(1973) que combina um esquema de primeira ordem e um de segunda e o esquema LODA (Local Oscillation Damping Algorithm) de Zhu e Leschziner(1988) que combina um esquema de primeira ordem e o esquema QUICK.
- ii) satisfação do critério de limitação dos fluxos convectivos que é o caso, por exemplo, dos esquemas SMART (Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport) de Gaskell e Lau(1988), ULTIMATE (Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equations) de Leonard(1988b) e NOTABLE (New Option for the Treatment of Advection in the Boundary Layer Equations) de Pascau e Pérez(1993).

Neste trabalho optou-se pelo segundo método, começando pelo esquema SMART, pois o mesmo já foi utilizado em simulações de escoamentos turbulentos similares ao estudado neste trabalho como relatado na literatura (vide, por exemplo, Neto et al., 1993 e Gaskell e Lau, 1987). Os outros esquemas ULTIMATE e NOTABLE foram escolhidos pela simplicidade de aplicação a partir do algoritmo para o SMART.

Portanto, relata-se aqui resultados de experiências de se limitar as oscilações provocadas pelo esquema QUICK com os esquemas SMART, ULTIMATE e NOTABLE no caso do transporte passivo de energia num escoamento bidimensinal fortemente convectivo em torno de um degrau (Número de Reynolds - baseado na altura do degrau e na velocidade, U_o na entrada antes do degrau - da ordem de 10^4).

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA DE SIMULAÇÃO

O programa CUTEFLOWS foi desenvolvido a partir de modificações sucessivas de programas da família do já bem conhecido programa TEACH (Teaching Elliptic Axisymmetrical Characteristics Heuristically) que foi desenvolvido no Imperial College, Londres. Nas teses de Schuler-(1990) e Treidler(1991) encontram-se os principais desenvolvimentos que caracterisam a versão utilizada aqui. Ele foi validado nos casos de simulações de escoamentos laminares e não-estacionários com separação (convecção forçada e mixta).

Na referência Schuler et al.(1991) pode-se encontrar uma descrição detalhada do programa CUTEFLOWS. Apresenta-se, em seguida, as suas principais características, as equações resolvidas para o caso bidimensional, o algoritmo para o avanço no tempo e as condições de contorno para o caso do degrau.

O procedimento numérico resolve diretamente os campos de velocidade e temperatura em termos de suas variáveis primitivas. As equações discretizadas são obtidas pela Técnica de Volumes Finitos utilizando malhas cartesianas desencontradas. Para os termos de difusão emprega-se o esquema Centrado e para os termos de convecção o esquema QUICK. Resolve-se o sistema de equações resultante empregando-se um esquema explícito preditor corretor do tipo Runge-Kutta de segunda ordem. O campo de velocidade a divergência nula é decomposto, segundo o Método de Chorin (Maliska, 1995), em um campo de velocidade (pseudo) que é independente da pressão mais um termo que representa a contribuição da pressão. A equação discretizada para a pressão é obtida a partir das equações de Continuidade e de Movimento discretizadas. Esta equação é resolvida pelo Método dos Gradientes Conjugados. No que diz respeito às condições limites, pode-se impor condições do tipo Dirichlet, Neumann, periódicas ou "saída livre".

Equações

As equações de Continuidade, de Quantidade de Movimento nas direções x e y e de Energia são, respectivamente:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v u)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) \tag{2}$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) \tag{3}$$

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u T)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v T)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\alpha\frac{\partial T}{\partial y}\right) \tag{4}$$

onde α é a difusividade térmica.

Avanço no tempo: Algoritmo

Descreve-se abaixo o procedimento para se obter a componente de velocidade na direção x - u e a temperatura T utilizando o esquema explícito preditor-corretor do tipo Runge-Kutta de segunda ordem. Para a componente v, o procedimento é análogo ao da componente u.

Pode-se colocar as equações discretizadas para u e T na forma:

$$\frac{\partial u_p}{\partial t} = \frac{[\hat{g}_p(\vec{u}) + \Pi^u(\vec{u})]}{\rho \Delta V^u} \tag{5}$$

$$\frac{\partial T_p}{\partial t} = \frac{h_p(\vec{u}, T)}{\Delta V^s} \tag{6}$$

onde $\hat{g}_p$ e h_p representam as aproximações em diferenças finitas para os termos de convecção ou de difusão, $\Pi^u(\vec{u})$ o termo de pressão integrado sobre o volume de controle e ΔV^u e ΔV^s os volumes das malhas para u e para as variáveis escalares, respectivamente.

O procedimento se decompõe em oito passos consecutivos a partir dos campos de temperatura e de velocidade satisfazendo a Equação de Continuidade no instante t (que corresponde ao enésimo passo de tempo - Δt).

- **Passo 1**: Calcula-se as pseudo-velocidades, $\hat{\vec{u}}^{n+1/2}$ no instante $t + \frac{\Delta t}{2}$ ignorando o termo de pressão na equação 5:

$$\hat{u}_p^{n+1/2} = u_p^n + \frac{\Delta t}{2}\frac{[\hat{g}_p(\vec{u}^n)]}{\rho \Delta V^u} \tag{7}$$

- **Passo 2**: Determina-se o campo de pressão no instante t a partir de um sistema de equações lineares que impõe a continuidade ao campo de velocidade $\hat{\vec{u}}^{n+1/2}$.
- **Passo 3**: Utiliza-se a equação 5 e a pressão no instante t, p^n para calcular a velocidade no instante $t + \frac{\Delta t}{2}$

$$u_p^{n+1/2} = \hat{u}_p^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\Pi^u(\vec{u}^n)}{\rho \Delta V^u} \tag{8}$$

- **Passo 4**: Calcula-se o campo de temperatura no instante $t + \frac{\Delta t}{2}$ a partir dos campos no instante t

$$T_p^{n+1/2} = T_p^n + \frac{\Delta t}{2}\frac{h_p(\vec{u}^n, T^n)}{\Delta V^s} \tag{9}$$

- **Passo 5**: Calcula-se as pseudo-velocidades no instante $t + \Delta t$

$$\hat{u}_p^{n+1} = u_p^n + \Delta t\frac{[\hat{g}_p(\vec{u}^{n+1/2})]}{\rho \Delta V^u} \tag{10}$$

- **Passo 6**: Determina-se o campo de pressão no instante $t + \Delta t$ impondo-se a continuidade ao campo de velocidade $\hat{\vec{u}}^{n+1}$

- **Passo 7**: Utiliza-se o campo de pressão $p^{n+1/2}$ para determinar a velocidade no instante $t + \Delta t$

$$u_p^{n+1} = \hat{u}_p^{n+1} + \Delta t \frac{\Pi^u\left(\vec{u}^{n+1/2}\right)}{\rho \Delta V^u} \tag{11}$$

- **Passo 8**: Finalmente, calcula-se a temperatura no instante $t + \Delta t$

$$T_p^{n+1} = T_p^n + \Delta t \frac{h_p\left(\vec{u}^{n+1/2}, T^{n+1/2}\right)}{\Delta V^s} \tag{12}$$

Os passos até o de número 4 constituem a etapa de predição e os seguintes fazem parte da etapa de correção do Método Runge-Kutta.

Nos passos 2 e 6, para resolver o sistema de equações lineares, o processo iterativo com o Método dos Gradientes Conjugados termina quando o erro é menor que um valor fixado inicialmente (1×10^{-6} neste trabalho).

Conditições Limites

Conforme dito anteriorment, aplica-se o programa CUTEFLOWS ao caso do escoamento incompressível em torno de um degrau (backward facing step flow) seguindo os dados das experiências de Vogel e Eaton(1985), cujas condições de referência são:

- $Re_H = 28000$; h2/h1 = 1.25
- fluxo de calor - q_w - constante na parede inferior após o degrau tal que: $(T_w - T_o)_{max}$ é da ordem de 15K

Na figura 1, mostra-se o domínio de cálculo (cujo comprimento é aproximadamente 3.6 vezes o comprimento médio da zona de recirculação) e as condições limites.

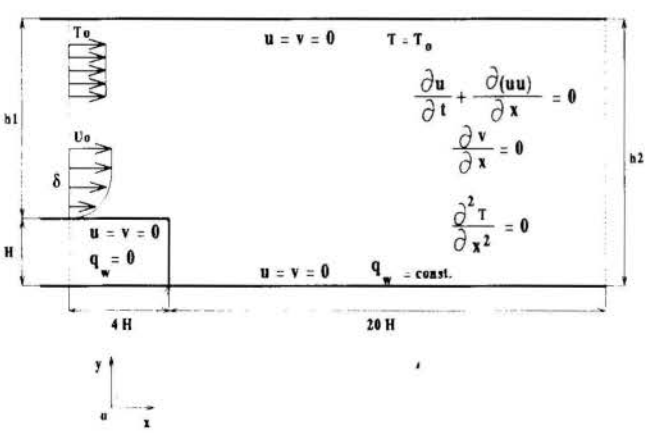


Figura 1: Condições Limites

Começa-se os cálculos a partir do repouso para os pontos interiores do meio fluido. Como condição inicial, para a temperatura, supõe-se um campo uniforme - $T(x, y, 0) = T_o$.

Nas paredes, impõe-se u = v = 0. Para a temperatura, impõe-se uma temperatura constante - T_o para a parede superior, um fluxo de calor nulo nas paredes laterais e a montante do degrau e um fluxo de calor constante - q_w na parede inferior a jusante do degrau.

Na entrada, impõe-se perfis uniformes para u ($\delta = 0$ e v=0) e T.

Na saída, utiliza-se a condição de saída livre para u

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial (uu)}{\partial x} = 0 \tag{13}$$

Para satisfazer a condição global de continuidade, acrescenta-se na saída à componente de velocidade u o termo

$$\delta u = \frac{\int_S u dA}{A_{\text{saída}}} \tag{14}$$

onde S é a superfície do domínio de cálculo.

No caso de u, negligencia-se a difusão na saída e, assim, pela continuidade, impõe-se para v um gradiente longitudinal nulo

$$\frac{\partial v}{\partial x} = 0 \tag{15}$$

e para a temperatura

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \tag{16}$$

ESQUEMAS PARA CONVECÇÃO COM LIMITADORES

Para descrever as limitações que se impõe aos esquemas de discretização para os termos convectivos, utiliza-se o *diagrama em variáveis normalizadas* que é mais conveniente para este tipo de análise (Leonard, 1988a). A interpolação de uma variável ϕ, sobre uma face de um volume de controle centrado em C, é normalizada com os valores nos nós a montante (índice U) e a jusante (índice D) do volume de controle em relação à direção de convecção (vide figura 2).

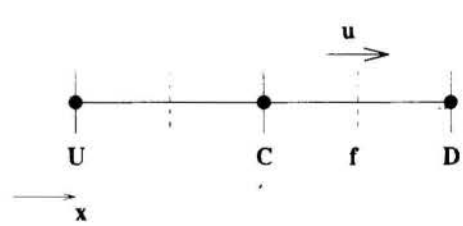


Figura 2: Notações para se Efetuar as Normalizações dos Esquemas

A variável ϕ normalizada, $\tilde{\phi}$ é definida por

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \tag{17}$$

Deste modo, $\tilde{\phi}_U = 0$ e $\tilde{\phi}_D = 1$. Para o esquema QUICK, o valor na face f de uma malha uniforme vale

$$\phi_f = \frac{1}{2}\left(\phi_D + \phi_C\right) - \frac{1}{8}\left(\phi_D - 2\phi_C + \phi_U\right) \tag{18}$$

e em termos de variáveis normalizadas

$$\tilde{\phi}_f = \frac{1}{2}\left(1 + \tilde{\phi}_C\right) - \frac{1}{8}\left(1 - 2\tilde{\phi}_C\right) \tag{19}$$

Para o esquema a montante de primeira ordem (upwind)

$$\phi_f = \phi_C \tag{20}$$

$$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C \tag{21}$$

e para o esquema em diferenças centrais de segunda ordem

$$\phi_f = \frac{1}{2}\left(\phi_D + \phi_C\right) \tag{22}$$

$$\tilde{\phi}_f = 0.75 + 0.5\left(\tilde{\phi}_C - 0.5\right) \tag{23}$$

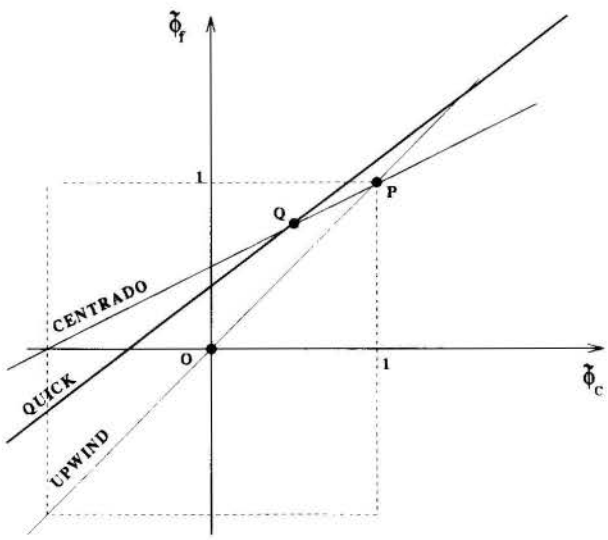


Figura 3: Diagrama em Variáveis Normalizadas

As interpolações normalizadas apresentadas acima são mostradas na figura 3. Segundo Leonard(1988a), a partir de uma análise do diagrama em variáveis normalizadas, pode-se deduzir as seguintes características para os esquemas de discretização:

- um esquema é de segunda ordem se a sua curva passa pelo ponto Q(0.5,0.75) e ele é de terceira ordem se, além de passar pelo ponto Q, possuir neste ponto uma inclinação de 3/4 (como para o esquema QUICK);
- se a curva de um esquema passa através do segundo quadrante acima do ponto P (para o caso bidimensional), oscilações podem ser produzidas e se a curva passa pelo quarto quadrante, o esquema é difusivo.

Pode-se concluir que um esquema de terceira ordem que não é difusivo e que não provoca oscilações deve, no diagrama em variáveis normalizadas, passar pelos pontos O(0,0), Q(0.5,0.75) (com uma inclinação de 3/4) e P(1,1) e que, assim, $\tilde{\phi}_f$ deve ser função não-linear de $\tilde{\phi}_C$.

Gaskell e Lau(1988) mostram que a condição necessária e suficiente para que os fluxos convectivos sejam limitados para um esquema dado é:

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq 1 & \text{se } \tilde{\phi}_C \in [0,1] \\ \tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{24}$$

Aparentemente, se $\tilde{\phi}_C < 0$ ou $\tilde{\phi}_C > 1$ não se tem escolha: deve-se utilizar os esquema a montante de primeira ordem (upwind). No entanto, na região monótona - $\tilde{\phi}_C \in [0,1]$ - pode-se vislumbrar diversas possibilidades para satisfazer a condição descrita acima. O esquema SMART de Gaskell e Lau(1988) é linear por trechos (vide figura 4):

$$\tilde{\phi}_f = \begin{cases} \tilde{\phi}_C & \text{se } \tilde{\phi}_C \notin [0,1]; \\ 3\tilde{\phi}_C & \text{se } \tilde{\phi}_C \in [0,1/6); \\ 1 & \text{se } \tilde{\phi}_C \in (5/6,1]; \\ \frac{3}{8}\left(2\tilde{\phi}_C + 1\right) & \text{se } \tilde{\phi}_C \in [1/6,5/6]. \end{cases} \tag{25}$$

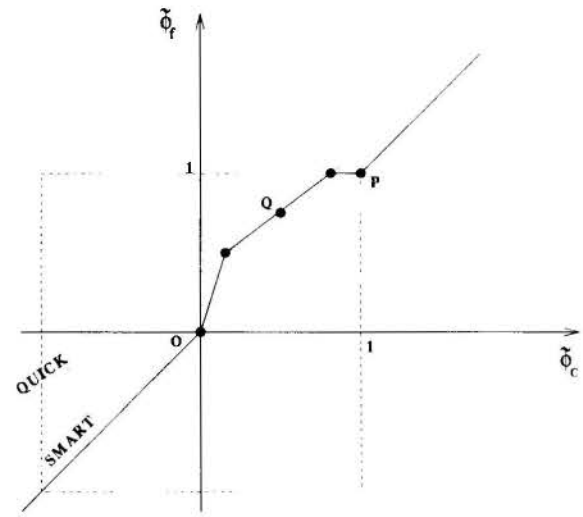


Figura 4: SMART: Diagrama em Variáveis Normalizadas

No caso de um avanço explícito no tempo, deve-se acrescentar na região monótona a condição (Gaskell e Lau, 1989 e Leonard, 1988b)

$$\tilde{\phi}_f \leq \frac{\tilde{\phi}_C{}^n}{c} \tag{26}$$

onde $c = u\frac{\Delta t}{\Delta x}$ é o Número de Courant, para que a solução ϕ_C^{n+1} no instante $t + \Delta t$ seja limitada, ou seja

$$\phi_C^{n+1} \in [\phi_C^n, \phi_U^n, \phi_D^n] \tag{27}$$

Os valores de $\tilde{\phi}_C$, $\tilde{\phi}_U$ e $\tilde{\phi}_D$ para o esquema SMART e os apresentados abaixo correspondem ao instante t (enésimo passo de tempo).

Nos casos dos esquemas NOTABLE de Pascau e Pérez-(1993) e ULTIMATE de Leonard(1988b) as diferenças em relação ao SMART se encontram na região monótona. Nesta região para o esquema NOTABLE, tem-se

$$\tilde{\phi}_f = \tilde{\phi}_C\left(\tilde{\phi}_C{}^2 - 2.5\tilde{\phi}_C + 2.5\right) \tag{28}$$

o que representa uma aproximação polinomial de terceira ordem passando pelos pontos O(0,0), Q(0.5,0.75) (com uma inclinação de 3/4) e P(1,1)no diagrama em variáveis normalizadas.

No caso do esquema ULTIMATE calcula-se inicialmente o valor de $\tilde{\phi}_f$ utilizando o esquema QUICK. Em seguida, limita-se o seu valor de acordo com o algoritmo

$$\tilde{\phi}_f = \begin{cases} \tilde{\phi}_C & \text{se } \tilde{\phi}_f < \tilde{\phi}_C; \\ \tilde{\phi}_C/c & \text{se } \tilde{\phi}_f > \tilde{\phi}_C; \\ 1 & \text{se } \tilde{\phi}_f > 1. \end{cases} \tag{29}$$

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Devido às limitações de tempo de processamento, para se poder realizar os testes com os diversos esquemas utilizou-se uma malha uniforme em x e y de 100 x 100 elementos. Nos casos dos esquemas com limitação este tempo é, aproximadamente 30% superior ao do esquema QUICK. O passo de tempo utilizado foi de 1.0×10^{-5}s, garantindo-se assim um Número de Courant inferior a 1 em todas as malhas. Para a determinação das médias temporais um intervalo que cobre 5.0×10^4 passos de tempo foi utilizado. Testes apresentados na referência (Bortolus, 1995) indicam que este intervalo é suficiente para isto. O tempo de cálculo em média por passo de tempo foi de aproximadamente 6 segundos numa estação de trabalho HP-700 no caso do esquema QUICK.

Os testes mostraram que, praticamente, não há diferenças entre os resultados dos esquemas SMART, NOTABLE e ULTIMATE. Desta maneira, mostra-se aqui apenas os resultados com o esquema SMART. Apesar de evitar oscilações, estes esquemas difundem muito como observado nas figuras 5 - 8. Na figura 5 para exemplificar o problema de oscilação, mostra-se um perfil de temperatura instantâneo na região próxima da parede lateral do degrau ($x^* = -0.7$- ver equação 31).

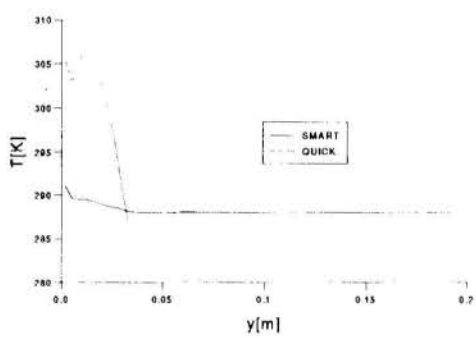


Figura 5: Perfil de Temperatura Instantânea

Nas figuras 6 e 7 são apresentados os perfis de temperatura média na região próxima da parede lateral do degrau e na zona de recolamento. Os perfis obtidos com os esquemas SMART e QUICK são comparados às experiências de Vogel e Eaton(1985). Apesar da malha relativamente grosseira utilizada nos teses, os perfis obtidos com o esquema QUICK são próximos dos perfis experimentais.

Na figura 8 compara-se as distribuições de Número de Nusselt médio normalizadas pelo Número de Nusselt máximo - Nu_{max} obtidas com os esquemas SMART e QUICK e as obtidas experimentalmente. Nesta figura, o Número de Nusselt é definido por

$$Nu = \frac{h.H}{k} \tag{30}$$

onde $h = q_w/(T_w - T_o$, sendo que q_w e T_w são o o fluxo de calor e a temperatura parietais e T_o é temperatura na

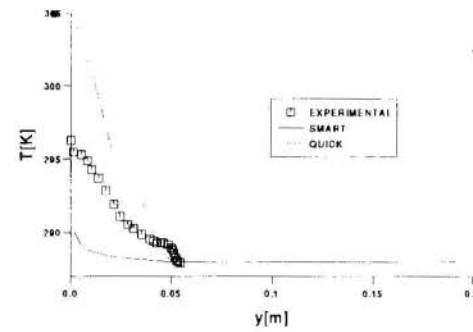


Figura 6: Perfil de Temperatura Média Próximo à Parede Lateral

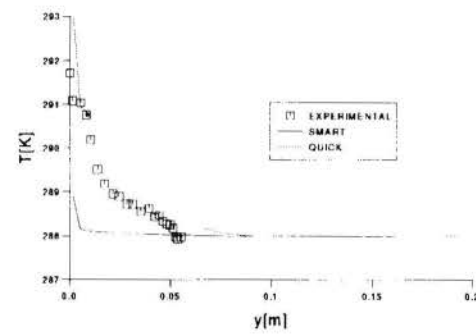


Figura 7: Perfil de Temperatura Média na Zona de Recolamento

entrada, e x^* é a distância relativa ao ponto de recolamento médio, definida como:

$$x^* = \frac{x - Xr}{Xr} \tag{31}$$

onde Xr é comprimento da zona de recirculação média.

Neste caso também a distribuição obtida com o esquema QUICK está mais próxima da experimental que a obtida com o esquema SMART. O Nu_{max} experimental vale aproximadamente 65 e o determinado com o esquema QUICK é 30% inferior a este valor. Esta diferença é devida em grande parte á malha relativamente grossa utilizada nas simulações. Nota-se, próximo à parede lateral, nas distribuições obtidas numericamente a presença de um mínimo local. Isto é devido à presença de um turbilhão contrarotativo (em relação à zona de recirculação) que é mais intenso nas simulações em função da consideração de bidimensionalidade do escoamento.

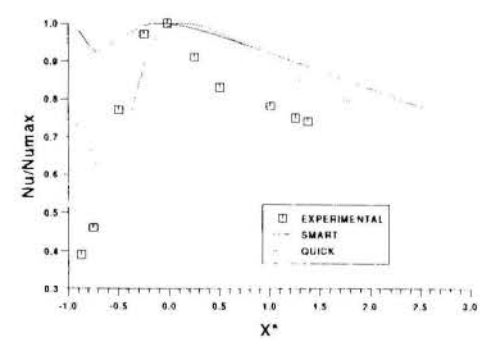


Figura 8: Distribuição de Número de Nusselt

Um dos principais problemas com os esquemas com limitadores do tipo dos testados neste trabalho é a sua generalização. Normalmente, estes esquemas são desenvolvi-

dos para casos de convecção linear, unidimensional e velocidade de convecção constante. De acordo com Leonard-(1988b), em outras situações deve-se acrescentar condições suplementares que, no entanto, podem comprometer o algoritmo no que diz respeito ao tempo de processamento. Como visto aqui, o aumento de tempo de processamento pode ser considerável. Além disto, também de acordo com Leonard(1988b), nas regiões onde a velocidade muda de sentido talvez não seja conveniente se impor a condição de limitação na região monótona. Normalmente, nos casos de aplicação do esquema SMART em escoamentos turbulentos com recirculação a ordem de grandeza da viscosidade efetiva (física) é duas ou três ordens superior à viscosidade molecular (vide, por exemplo, Modelo k - ϵ Gaskell e Lau, 1987 e LES - Large Eddy Simulation Neto et al.(1993).

CONCLUSÕES

Os resultados aqui apresentados indicam que os esquemas SMART, NOTABLE e ULTIMATE, quando aplicados a escoamentos com recirculação fortemente não-estacionários, apesar de evitarem oscilaçẽs são difusivos. No que diz respeito ao cálculo do campo de temperatura médio os resultados com o esquema QUICK sem limitação são mais próximos das experiências que os obtidos com aqueles.

Como comentado na seção anterior, tentativas de se resolver o problema estão ligadas à generalização destes esquemas que são desenvolvidos para casos de convecção linear, unidimensional e velocidade de convecção constante. Contudo para que isto seja viável em simulações desta natureza deve-se levar em consideração o tempo de processamento. Além disto, como os três esquemas diferem apenas na região monótona e não se encontrou aqui diferenças significativas entre eles, talvez fosse o caso de se reconsiderar a condição fora desta região.

REFERÊNCIAS

Boris, J. P.P. e Book, D.L., 1973, "Flux Corrected Transport I: SHASTA, a Fluid Algorithm that Works", *Journal of Computational Physics*, Vol. 11, pp. 38-47.

Bortolus, M.V., 1995, "Modélisation et Simulation des Transferts Thermiques Pariétaux en Ecoulement Turbulent Complexe", Tese, Universidade Paul Sabatier, Toulouse.

Gaskell, P.H. e Lau, A.K.C., 1987, "An Assessment of Direct Stress Modelling for Elliptic Turbulent Flows with the Aid of a Non-diffusive, Boundedness Preserving, Discretization Scheme", *Anais, Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, Taylor, C. et al., ed., Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol. 5, pp.351-362.

Gaskell, P.H. e Lau, A.K.C., 1988, "CurvatureCompensated Convective Transport: SMART, a New Boundedness-preserving Transport Algorithm", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 8, pp. 617-641.

Gaskell, P.H. e Lau, A.K.C., 1989, "Unsteady Flow: a Curvature Compensated Approch", *Anais, Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, Taylor, C. et al., ed., Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol. 6, pp.51-61.

Leonard, B.P., 1979, "A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 19, pp. 59-98.

Leonard, B.P., 1988a, "Simple High-accuracy Resolution Program for Convective Modelling of Discontinuities", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 8, pp. 1291-1318.

Leonard, B.P., 1988b, "Universal Limiter for Transient Interpolation Modelling of the Advective Transport Equations: the ULTIMATE Conservative Difference Scheme", NASA Technical Memorandum 100916 ICOM-88-11.

Maliska, C.R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro.

Neto, A.S., Grand, D., Métais, O. e Lesieur, M., 1993, "A Numerical Investigation of the Coherent Vortices in Turbulence Behind a Backward-Facing Step", *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 256, pp. 1-25.

Pascal, A. e Pérez, C., 1993, "A Well-Behaved Scheme to Model Strong Convection in a General Transport Equation", *Anais, Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*, Taylor, C. et al., ed., Pineridge Press, Swansea, U.K., Vol. 6, pp.608-618.

Schuler, C. A., 1990, "Investigation of the Flow Between Rotating Disks in an Enclosure", Ph.D. Thesis, University of California, Berkeley.

Schuler, C.A., Treidler, E.B. e Humphrey, J.A.C., 1991, "CUTEFLOWS (Computing Unsteady Three-dimensional Elliptic Flows) - A User's Guide", Computer Mechanics Laboratory Report#Gold91-001, University of California, Berkeley.

Smith, R.M. e Hutton, A.G., 1982, "The Numerical Treatment of Advection: a Performance Comparison of Current Methods", *Numerical Heat Transfer*, Vol. 5, pp. 439-461.

Treidler, E.B., 1991, "An Experimental and Numerical Investigation of Flow Past Ribs in a Channel", Ph.D. Thesis, University of California, Berkeley.

Vogel, J.C. e Eaton, J.K., 1985, "Combined Heat Transfer and Fluid Dynamic of a Backward-Facing Step", ASME *Journal of Heat Transfer*, Vol. 107, pp. 922-929.

Zhu, J. e Leschziner, M.A., 1988, "A Local Oscillation-damping Algorithm for Higher Order Convection Schemes", *Computer Methods in Applied Mechanics*, Vol. 67, pp. 355-366.

ABSTRACT

Convective discretization schemes for the numerical simulation of passive scalar transport in recirculating turbulent flows are analysed. Numerical oscillations are found when Leonard's scheme QUICK (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics) is used. Three Boundedness schemes - SMART (Gaskeel and Lau), NOTABLE (Pascau and Pérez) and ULTIMATE (Leonard) are applied to prevent the unphysical oscillations. The results of these numerical experiments are presented.

ADVANCES IN CFD SOFTWARE FOR HEAT TRANSFER AND COMBUSTION CALCULATIONS

Sanjay Mathur, Jayathi Y. Murthy and Dipankar Choudhury
Fluent Inc.
Lebanon, NH 03766, U.S.A.

SUMMARY

This paper presents a finite-volume scheme for multi-dimensional reacting fluid flows. Unstructured solution-adaptive meshes are used, with a cell-centered formulation. The SIMPLE algorithm is used for pressure-velocity coupling. Schemes for hanging-node and conformal adaption are presented. For combustion modeling, the eddy-breakup, and assumed-shape probability density function (PDF) models are implemented in the unstructured-mesh context. The methodology is applied to two benchmark problems; good agreement with experimental measurements is found.

NOMENCLATURE

$\vec{A}$	area vector
C_p	specific heat at constant pressure
D	diffusive flux
D_{eff}	effective diffusion coefficient
$\overline{f}$	mean mixture fraction
$\overline{f'^2}$	mixture fraction variance
F_i	body force in direction i
G_k	turbulence production
h	sensible enthalpy
H	total enthalpy
h_l	sensible enthalpy of specie l
J_l	diffusive flux of specie l in the mixture
J_f	mass flow rate on face f
k	turbulence kinetic energy
k_{eff}	effective conductivity
Le	Lewis Number
m_l	mass fraction of specie l
p	static pressure
R_l	chemical reaction term for specie l
S_ϕ	source of ϕ per unit volume
t	time
T	temperature
u_i	velocity component in direction i
x_i	coordinate direction
ΔV	volume of control volume
ϵ	turbulence dissipation rate
ϕ	transported scalar
Γ	diffusion coefficient
μ	molecular viscosity
μ_t	turbulence viscosity
ρ	density
τ_{ij}	stress tensor

INTRODUCTION

Most flows of interest to the combustion and commercial power generation industry are incompressible in nature. For this class of problems, pressure-based algorithms have been the rule; a variety of methods based on structured or block-structured body-fitted meshes have been developed (Karki & Patankar, 1989; Peric, 1985). Though the methodology has been extensively used for combustion modeling, the topological restrictions inherent to structured meshes make it difficult to model industrial geometries.

In the last few years, unstructured mesh methods have been developed which greatly ease mesh restrictions, and which permit solution adaption. Finite-volume schemes for incompressible flows were developed during the 1980's using the control-volume finite-element method (CVFEM) (Baliga & Patankar, 1983; Schneider & Raw, 1986; Prakash & Patankar, 1985). These schemes were based vertex-based and conservative, and used finite element-like shape functions to discretize the governing equations. A CVFEM scheme has been used to model combustion in (Fiveland *et al.* , 1996). Though these schemes relax the restrictions on mesh structure, they are generally quite expensive to use.

Recently, researchers have attempted to extend the pressure-based methodology so successfully used for structured meshes to unstructured meshes of arbitrary polyhedra (Mathur & Murthy, 1996). The present work applies the method described in (Mathur & Murthy, 1996) to a H_2-Air flame and to a swirling-stabilized natural gas flame using commonly used turbulence-chemistry interaction models. The objective is to demonstrate that this emerging CFD methodology is as robust and accurate as conventional structured mesh methods for combustion applications.

GOVERNING EQUATIONS

The equations for conservation of mass, momentum and energy are:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \tag{2}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) &+ \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(k_{\text{eff}}\frac{\partial T}{\partial x_i}\right) \\ &- \frac{\partial}{\partial x_i}\sum_l h_l\, J_l + \frac{Dp}{Dt} + (\tau_{ik})\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \end{aligned} \tag{3}$$

A Newtonian fluid is assumed, though other theologies can be admitted in the framework. Turbulence is computed using the $k - \epsilon$ model (Launder & Spalding, 1972):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho k) &+ \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_i}\right] \\ &+ G_k - \rho\epsilon \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon) &+ \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \epsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right)\frac{\partial \epsilon}{\partial x_i}\right] \\ &+ C_{1\epsilon}\frac{\epsilon}{k}G_k - C_{2\epsilon}\rho\frac{\epsilon^2}{k} \end{aligned} \tag{5}$$

For turbulent flames a variant of the eddy dissipation model originally proposed by Magnussen and Hjertager (1976) is used. It involves the solution of conservation equations for the mass fraction of species, which can be written as follows under the dilute approximation

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho m_i) &+ \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i m_l) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{eff}\frac{\partial m_l}{\partial x_i}\right) \\ &+ R_l \end{aligned} \tag{6}$$

The reaction rate R_l is computed as the minimum of the Arrhenius rate, and that due to turbulent mixing (Magnussen & Hjertager, 1976).

For turbulent diffusion flames, the mixture fraction/probability-density-function (PDF) approach is used where conservation equations are solved for the mean value of mixture fraction, $\overline{f}$, and its variance, $\overline{f'^2}$ (Jones & Whitelaw, 1982):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \overline{f}) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \overline{f}}{\partial x_i}\right) \tag{7}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\overline{f'^2}\right) &+ \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho u_i \overline{f'^2}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \overline{f'^2}}{\partial x_i}\right) \\ &+ C_g \mu_t \left(\frac{\partial \overline{f}}{\partial x_i}\right)^2 - C_d \rho \frac{\epsilon}{d}\overline{f'^2} \end{aligned} \tag{8}$$

For non-adiabatic systems, a total enthalpy equation is also solved, which for Le=1 can be written as

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho H) &+ \frac{\partial}{\partial X_i}(\rho u_i H) = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{k}{Cp}\frac{\partial H}{\partial x_i}\right) \\ &+ \frac{Dp}{Dt} + (\tau_{ik})\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \end{aligned} \tag{9}$$

When the kinetic reaction rate greatly exceeds the rate of mixing, instantaneous values of the species mole fractions, density and temperature may be computed from the instantaneous mixture fraction f and the total enthalpy by assuming chemical equilibrium. time averaged values of the mole fractions, density and temperature, can be obtained by weighting the instantaneous values with a probability density function, based on the mean mixture fraction and its variance; here a beta-PDF is employed. To speed up computations, the equilibrium calculations and the PDF integrations are performed in a preprocessing step, and the results are stored in lookup tables of time-averaged density, temperature and species mole fractions, as function of enthalpy and the mean and variance of mixture fraction.

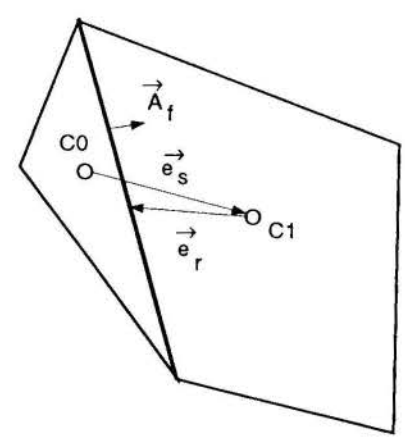


Figure 1: Control Volume

NUMERICAL METHOD

Discretization. The domain is discretized into arbitrary unstructured convex polyhedra. All transport variables are stored at cell centers. The governing equations are integrated over the polyhedron. Consider the differential equation for transport of a scalar quantity ϕ:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \phi) = \frac{\partial}{\partial x_i}\Gamma\frac{\partial \phi}{\partial x_i} + S_\phi \tag{10}$$

Integration and discretization about the control volume C0 shown in Figure 1 yields:

$$\sum_f J_f \phi_f = \sum_f D_f + (S_\phi \Delta V)_0 \tag{11}$$

where J_f is the mass flow rate and D_f is the diffusive flux through the face f and the summations are over all the faces of control volume.

For the face f between control volumes C0 and C1 shown in Figure 1 the diffusive flux can be written as

$$\begin{aligned} D_f &= \Gamma_f \frac{(\phi_1 - \phi_0)}{ds}\frac{\vec{A}_f \cdot \vec{A}_f}{\vec{A}_f \cdot \vec{e}_s} \\ &+ \bar{\nabla\phi} \cdot \vec{A} - \bar{\nabla\phi} \cdot \vec{e}_s \frac{\vec{A}_f \cdot \vec{A}_f}{\vec{A}_f \cdot \vec{e}_s} \end{aligned} \tag{12}$$

where ds is the distance between the cell centers.

The primary component (the first term on the RHS of the above equation) is treated implicitly. The derivative $\bar{\nabla\phi}$ at the face is taken to be the average of the derivatives at the two adjacent cells. This practice is analogous to central-differencing on a structured grid.

The face value ϕ_f used in computing the convective flux can be taken to be the value at the upwind cell, yielding a first order scheme. To achieve second order accuracy, a linear reconstruction procedure similar to that of Barth and Jesperson (1989) is used to write the face value as

$$\phi_f = \phi_{\text{upwind}} + \nabla\phi_{r\,\text{upwind}} \cdot \vec{e}_r$$

where $\vec{e}_r$ is the vector directed from the centroid of the upwind cell to the centroid of the face. $\nabla\phi_r$ is the reconstruction gradient of ϕ evaluated using the divergence theorem

$$\nabla\phi_r = \frac{\alpha}{\Delta V}\sum_f (\bar{\phi}_f \vec{A}_f)$$

where $\bar{\phi}_f$ is the average of the values of ϕ at the adjacent cells and α is a factor used to ensure that the reconstruction does not introduce local extrema. The limiter proposed by Venkatakrishnan (1993) is used in the present work.

The gradients used in the diffusion terms are computed by applying the divergence theorem with the reconstructed face values ϕ_f.

Linear Solver. The discretization procedure leads to a set of linear equations for the values of ϕ at the cell centers. Since the mesh is unstructured, the number of neighbors is not fixed, and familiar line-iterative solvers cannot be used. Instead, the system is solved using an algebraic multigrid procedure (Hutchinson & Raithby, 1986).

Pressure-Velocity Coupling. Pressure and the Cartesian components of velocity are stored at cell centers. A scheme similar to that of Rhie and Chow (1983) is used to interpolate pressure to the cell face and avoid pressure-checkerboarding. The SIMPLE algorithm (Patankar, 1980) is used for pressure-velocity coupling. Details are provided in (Mathur & Murthy, 1996).

Grid Adaption. The solution algorithm described above can handle both the traditional h-refinement as well as grids with "hanging-nodes" resulting from non-conformal grid adaption. In the latter case, cells marked for adaption are subdivided by introducing midpoint nodes at edges and/or cell and face centers. Since the discretization scheme can be used for arbitrary polyhedra, the non-conformal interfaces created by hanging node adaption require no special treatment.

RESULTS

Hydrogen/Air Diffusion Flame. The first case considered is the turbulent combustion of a round jet of hydrogen-argon in co-flowing air, shown in Figure 2. The conditions are summarized in Table 1. The computed results are compared to data taken from (Strahle & Lekoudis, 1985).

Computations are performed using both the mixture-fraction/PDF and eddy-dissipation models. The equilibrium mixture is assumed to consist of Ar, H_2, O_2, H_2O, N_2, H, O and OH.

The domain was assumed to be axisymmetric and initially discretized with an unstructured grid of 1727 cells. The grid was then adapted based on temperature gradients using non-conformal subdivision resulting in 4154 cells. Figure 3 shows the detail of the adapted grid near the fuel inlet. The second-order scheme described above is used for all transported variables.

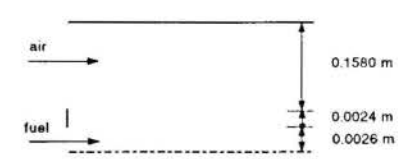


Figure 2: H2-Air Flame – Schematic

Table 1: H_2/Air Diffusion Flame: Summary of Operating Conditions

	Fuel Stream	Air Stream
Mean Axial Velocity (m/s)	75	9.2
Inlet Temperature(K)	300	293
Turbulence Intensity (%)	4.5	0.5
Turbulence Length Scale (mm)	52	33.8
Mass fraction	H_2-0.15, Ar-0.85	O_2-0.23, N_2 0.77

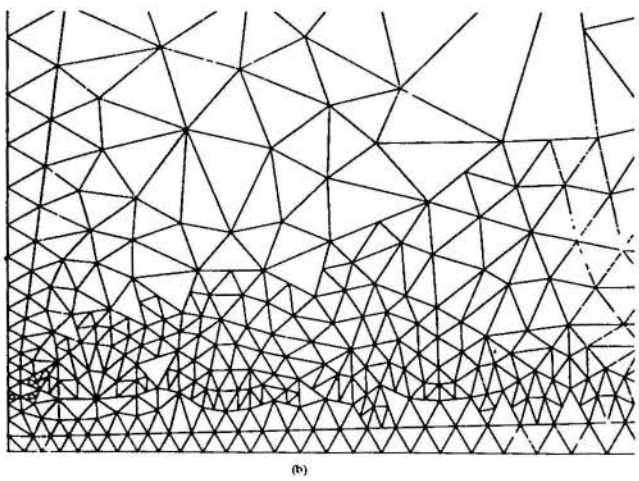


Figure 3: H2-Air Flame - Grid

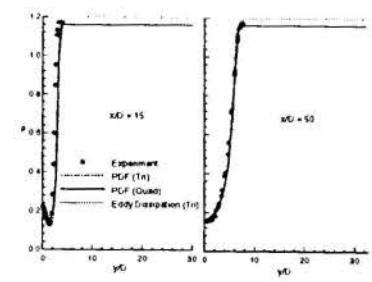


Figure 4: H2-Air Flame - Density Profiles

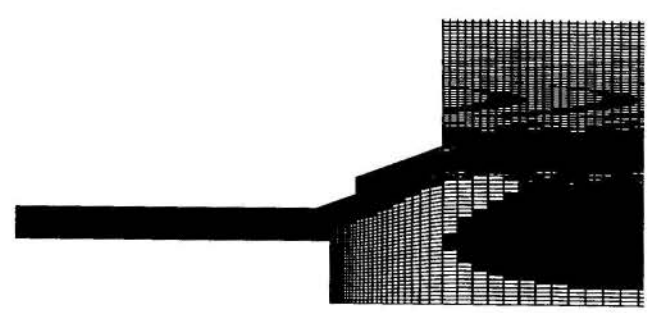


Figure 5: BERL Furnace - Detail of adapted grid near inlet

Figure 4 shows density profiles at two axial locations obtained with the PDF and eddy-dissipation models. In addition to the results obtained on the adapted triangular mesh, results obtained with a structured grid of 149x29 cells are also shown. Both the triangle and quadrilateral mesh results compare well with the experimental data. Since dissociation effects are not significant in this dilute flame, the eddy-dissipation and PDF models yield similar results.

Swirl Stabilized Natural Gas Flame. Combustion of natural gas in a 300 kW swirl-stabilized burner is considered next. Data for this geometry have been published by Fiveland et al (1996), who have also compared them with computations from a CVFEM-based solver.

The geometry is modeled as two-dimensional and axisymmetric. A mesh of 9784 quadrilateral cells was used to compute a base solution, and adapted to swirl using hanging-node adaption. This resulted in a mesh of 22,477 cells. A portion of the mesh is shown in Figure 5; the shape of the high-swirl region may be discerned from the grid.

The mixture-fraction/PDF model was used for turbulence-chemistry interaction. The equilibrium mixture is assumed to consist of CH_4, C_2H_6, C_3H_8, C_4H_8, CO_2, N_2, O_2, H_2, CO, CH, H_2, O, OH and N (Faltsi-Saravelou *et al.* , 1996). Because the flow is non-adiabatic, the total enthalpy equation is solved. The P-1 model (Cheng, 1964; Siegel & Howell, 1992) is used to model radiation. An additional transport equation is solved for the swirl velocity. The second-order scheme described above is used for all transported variables.

Streamlines and isotherms are shown in Figures 6 and 7. The formation of an internal recirculation zone driven by swirl is clearly visible. Radial profiles of computed tangential velocities at distance of 27 mm from the quarl exit is presented in Figure 8, along with experimental measurements from (Fiveland *et al.* , 1996). A plot of mole fraction of O_2 is presented in Figure 9 for the same location. Reasonable agreement is found between the computations and experiment. The thin reaction layer

at x = 27 mm can be seen in the plot of species concentration. Interestingly, the predictions are very similar to those obtained by Fiveland et al (1996) using a 2-D axisymmetric domain, with a CVFEM scheme and an eddy-dissipation model for turbulence.

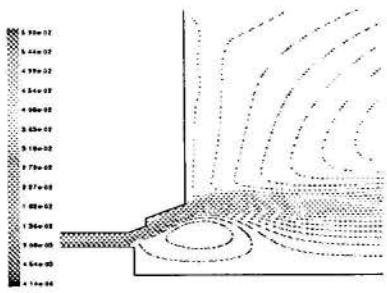


Figure 6: BERL Furnace – Streamlines

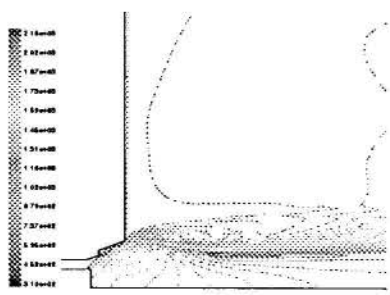


Figure 7: BERL Furnace – Temperature Contours

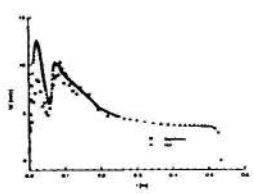


Figure 8: BERL Burner – Swirl Velocity Profile at x = 27mm

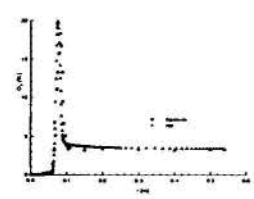


Figure 9: BERL Burner – O_2 Mass Fraction Profile at x = 27mm

CLOSURE

A novel conservative finite-volume scheme is used to obtain predictions of turbulent diffusion flames. Computations are performed with unstructured triangular and quadrilateral meshes, and the use of solution adaption is demonstrated. Reasonable agreement with experimental data is obtained. The computations demonstrate the feasibility of using the scheme for the prediction of combustion in industrial burners and furnaces.

ACKNOWLEDGEMENTS

We wish to acknowledge the contributions of N. Behera, S.E. Kim, J. Maruszewski, W. Smith and G. Spragle of Fluent Inc. to various aspects of this work. We wish to acknowledge useful discussions with M. Makhlouf and P. Wild of Fluent Europe regarding the modeling of the validation problems, and the use of the PDF look-up tables provided by them. The use of Fluent Inc.'s solvers FLUENT/UNS, PrePDF and PreBFC is gratefully acknowledged.

REFERENCES

Baliga, B. R., & Patankar, S. V. 1983. A Control-Volume Finite Element Method for Two-Dimensional Fluid Flow and Heat Transfer. *Numerical Heat Transfer*, **6**, 245–261.

Barth, T. J., & Jespersen, D. C. 1989 (Jan.). *The Design and Application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes.* AIAA 89-0366.

Cheng, P. 1964. Two-Dimensional Radiating Gas Flow by a Moment Method. *AIAA Journal*, **2**, 1662–1664.

Faltsi-Saravelou, O., Makhlouf, M., & Wild, P.N. 1996. *NOx Prediction in Swirling Natural Gas Flames.* in preparation.

Fiveland, W.A., Kaufman, K.C., & Jesse, J.P. 1996. *Validation of an Industrial Flow and Combustion Model.* To be presented at the National Heat Transfer Conference, Houston 1996.

Hutchinson, B. R., & Raithby, G. D. 1986. A Multigrid Method Based on the Additive Correction Strategy. *Numerical Heat Transfer*, **9**, 511–537.

Jones, W. P., & Whitelaw, J. H. 1982. Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review. *Combust. Flame*, **48**, 1–26.

Karki, K.C., & Patankar, S.V. 1989. Pressure Based Calculation Procedure for Viscous Flows at All Speeds in Arbitrary Configurations. *AIAA Journal*, **27**(9), 1167–1174.

Launder, B. E., & Spalding, D. B. 1972. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. London, England: Academic Press.

Magnussen, B. F., & Hjertager, B. H. 1976 (Aug.). *Mathematical Models of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion*. 16th Symp. (International) on Combustion, Cambridge, MA.

Mathur, S.R., & Murthy, J.Y. 1996. *A Pressure Based Method for Unstructured Meshes*. to appear in Numerical Heat Transfer.

Patankar, S. V. 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill New York.

Peric, M. 1985. *A Finite Volume Method for the Prediction of Three-Dimensional Fluid Flow in Complex Ducts*. Ph.D. thesis, University of London.

Prakash, C., & Patankar, S. V. 1985. A Control-Volume Based Finite Element Method for Solving the Navier-Stokes Equations using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation. *Numerical Heat Transfer*, **8**, 259–280.

Rhie, C.M., & Chow, W.L. 1983. Numerical Study of the Turbulent Flow Past an Airfoil with Trailing Edge Separation. *AIAA Journal*, **21**(11), 1523–1532.

Schneider, G. E., & Raw, M. J. 1986. A Skew Positive Influence Coefficient Upwinding Procedure for Control Volume Based Finite-Element convection Diffusion Computation. *Numerical Heat Transfer*, **9**, 1–26.

Siegel, R., & Howell, J. R. 1992. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Washington D.C.: Hemisphere Publishing Corporation.

Strahle, W.C., & Lekoudis, S.G. 1985. *Evaluation of Data on Simple Turbulent Reacting Flows*. Tech. rept. AFOSR TR-85 0880. Georgia Institute of Technology.

Venkatakrishnan, V. 1993 (Jan). *On The Accuracy of Limiters and Convergence to Steady State Solutions*. AIAA 93-0880.

MODELADO DE REACTORES DE LECHO SUSPENDIDO PARA LA BIODEGRADACION ANAEROBIA DE EFLUENTES LIQUIDOS CON ELEVADA CARGA ORGANICA

Enrique D. Negri
Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
INTEC - (UNL - CONICET)
Güemes 3450 - (3000) Santa Fe - Argentina

RESUMEN

Se presenta un modelo general de reactor anaerobio de lecho suspendido para la digestión de materia orgánica soluble en fase líquida. Este tipo de reactores es una alternativa de interés tanto en el tratamiento de efluentes líquidos domiciliarios como industriales. El modelo se construyó en base a las ecuaciones de balance promediadas en el volumen de reacción. El modelo general permite analizar distintas variantes que se presentan, como así también identificar adecuadamente las hipótesis contenidas en los desarrollos.

INTRODUCCION

Se desarrolló un modelo general de reactor biológico heterogéneo isotérmico de lecho suspendido para la degradación de materia orgánica disuelta en agua. Esencialmente consiste de un sistema de tres fases: una sólida (la biomasa soportada), la fase continua líquida (que contiene el sustrato a eliminar y microorganismos libres) y una fase gaseosa (biogas generado en la degradación anaerobia). Se consideró un esquema de reacción simplificado en el que todo el ecosistema anaerobio se encuentra concentrado en una sola seudo especie, y suponiendo que el sustrato orgánico no es volátil, se obtuvo un modelo general utilizando promediación volumétrica para cada una de las fases involucradas. Se obtuvo una representación rigurosa de este tipo de reactores con las hipótesis mencionadas, lo que permite analizar distintos casos típicos, al mismo tiempo que individualiza flujos interfaciales a tener en cuenta para una representación realista de los mismos. Se destaca la necesidad de considerar un flujo de biomasa entre el "biofilm" y la fase continua.

Se analizaron resultados experimentales publicados (Switzenbaum y Jewell, 1980) para este tipo de reactores para el caso de estado estacionario y dispersión axial despreciable. Se realizó un análisis de las variables representativas.

SISTEMA REACCIONANTE

Se consideró un esquema de reacción simplificado en el que todo el ecosistema anaerobio se encuentra concentrado en una sola seudo especie (X), que va a estar esencialmente depositada sobre el soporte inerte y que concentra la degradación de carga orgánica a biogas:

$$\textit{Carga Orgánica} + X \longrightarrow \textit{Biogas} + X$$

Se supone además que la resistencia del "biofilm" a la transferencia de materia es despreciable, por lo que no habrá gradiente de concentraciones en la fase sólida.

MODELADO DEL REACTOR

Un modelo general de reactor biológico trifásico, unidimensional, con flujo pistón se desarrolló en base a la aplicación de promedios volumétricos a cada una de las especies consideradas en cada una de las fases involucradas. Se tienen en cuenta tres fases: una continua (α) formada por el efluente a tratar, y dos discontinuas, una "sólida" (β) (el "biofilm" soportado), y una gaseosa (γ) (formada por el biogas) (Fig. 1). Se supone que el sustrato orgánico no es volátil (en la fase

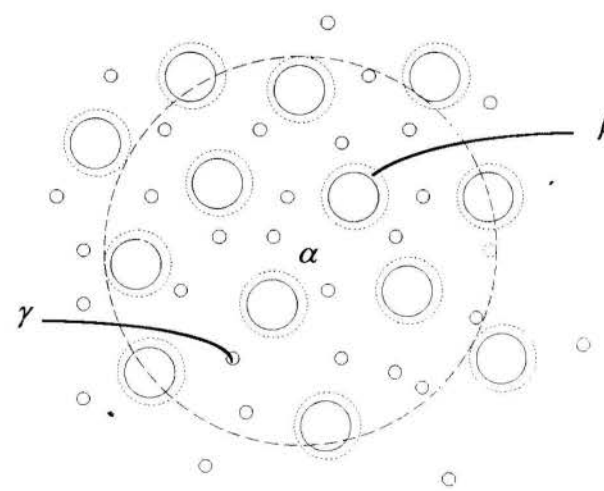


Figura 1 - Representación general del sistema

gaseosa hay sólo biogas), y que no hay gradientes de concentración en la fase gaseosa.

Suponiendo despreciables las reacciones de degradación en el fluido (sólo la biomasa soportada es capaz de metabolizar y degradar carga orgánica) (Negri y otros, 1993), la formulación

general para una especie (i) en la fase α se puede representar de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\varepsilon_\alpha \langle \rho_{i\alpha}\rangle^\alpha\right) + \underline{\nabla}\cdot\left(\langle \underline{v}_\alpha\rangle\langle \rho_{i\alpha}\rangle^\alpha\right) + \underline{\nabla}\cdot\left\langle \tilde{\rho}_{i\alpha}\tilde{\underline{v}}_\alpha\right\rangle =$$

$$= -\underline{\nabla}\cdot\left\langle \underline{j}_{i\alpha}\right\rangle + \frac{1}{V}\int_{A_{\alpha\beta}} \rho_{i\alpha}\left(\underline{v}_{i\alpha} - \underline{w}_{\alpha\beta}\right)\cdot \underline{n}_{\alpha\beta}\, dA +$$

$$+ \frac{1}{V}\int_{A_{\alpha\gamma}} \rho_{i\alpha}\left(\underline{v}_{i\alpha} - \underline{w}_{\alpha\gamma}\right)\cdot \underline{n}_{\alpha\gamma}\, dA \qquad (1)$$

donde ε representa la fracción volumétrica de la fase considerada, $\langle\ \rangle$ representa una variable o expresión promediada en el volumen total y $\langle\ \rangle^\alpha$ representa un promedio volumétrico intrínseco (en el volumen de la fase). Los términos integrales tienen en consideración los flujos convectivos interfaciales y $\underline{j}$ representa el flujo difusivo de una especie. Por último el supraíndice ~ representa la perturbación espacial de una variable promediada (Whitaker, 1986).

La fase continua (α) del modelo considera las especies (i): sustrato soluble (S), bacterias libres (X') y gas disuelto (C_G'):

$$\frac{\partial(\varepsilon_\alpha S)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_s S\right) = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_S \frac{\partial S}{\partial z}\right) - \mu_x \frac{SX}{K+S}\varepsilon_\beta \qquad (2)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_\alpha C_G')}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_s C_G'\right) = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_G \frac{\partial C_G'}{\partial z}\right) +$$

$$+ (1 - Y_x)\mu_x \frac{SX}{K+S}\varepsilon_\beta - \dot{G} \qquad (3)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_\alpha X')}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_s X'\right) = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_X \frac{\partial X'}{\partial z}\right)$$

$$+ F_x^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} \qquad (4)$$

donde z representa la posición axial del reactor, t es la variable independiente temporal, ε representa la fracción volumétrica de la fase subindicada, y a es el área interfacial por unidad de volumen de reactor. Se supone una velocidad de reacción del tipo Monod, un factor de eficiencia de la reacción biológica (Y_x), un flujo interfacial de biomasa que pasa del estado libre al soportado y viceversa $\left(F_x^{\alpha\beta}\right)$, y que el flujo interfacial de gas es $\dot{G}$.

La fase sólida (β) se supone compuesta solamente por la biomasa depositada (X):

$$\frac{\partial(\varepsilon_\beta X)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_x X\right) = -F_x^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} +$$

$$\left(\mu_x \frac{SX}{K+S} Y_x - b\,X\right)\varepsilon_\beta \qquad (5)$$

La fase gaseosa (γ) consiste únicamente de biogas (C_G):

$$\frac{\partial(\varepsilon_\gamma C_G)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left(v_G C_G\right) = \dot{G} \qquad (6)$$

Con las suposiciones adicionales de estado estacionario y que no hay dispersión axial se puede obtener el siguiente sistema de ecuaciones que caracterizan el modelo presentado:

$$v_s \frac{d}{dz} S = -\mu_x \frac{SX}{K+S}\varepsilon_\beta \qquad (7)$$

$$v_s \frac{d}{dz} C_G' = (1 - Y_x)\,\mu_x \frac{SX}{K+S}\varepsilon_\beta - \dot{G} \qquad (8)$$

$$v_s \frac{d}{dz} X' = F_x^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} \qquad (9)$$

$$\frac{d}{dz}\left(v_x X\right) = -F_x^{\alpha\beta} a_{\alpha\beta} + \left(\mu_x \frac{SX}{K+S} Y_x - b\,X\right)\varepsilon_\beta \qquad (10)$$

$$\frac{d}{dz}\left(v_G C_G\right) = \dot{G} \qquad (11)$$

Las condiciones de contorno de este modelo son elementales condiciones de borde que se corresponderán con el esquema de flujo del reactor en consideración.

MODELO FLUIDODINAMICO

En este tipo de reactor, la fracción volumétrica de las fases estará definida por la fluidodinámica del sistema, ya que depende directamente del grado de expansión del lecho suspendido. Para representar esto se ha recurrido a correlaciones conocidas (Perry, 1973):

$$u_{ts} = u_t\,(\varepsilon_\alpha)^n \qquad (12)$$

donde n es una función del número de Reydnolds de la partícula u_t es la velocidad terminal de decantación de una partícula única que se puede calcular:

$$u_t = 3269.35\sqrt{d_p\left(\frac{\rho_p - \rho}{\rho}\right)} \qquad (13)$$

donde ρ_p es la densidad de la partícula, ρ es la densidad del fluido, y la velocidad terminal está dada en cm/min. la expansión porcentual del lecho (e) se puede definir:

$$e = 100\,\frac{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\alpha^0}{1 - \varepsilon_\alpha} \qquad (14)$$

donde el supraíndice ^{0} en la fracción volumétrica del fluido implica la del lecho en reposo. En general la fracción volumétrica de la fase gaseosa en el reactor será despreciable.

La superficie específica de la interfase "biofilm" - fluido se puede calcular suponiendo partículas de diámetro único, y pequeño respecto a las dimensiones características del reactor:

$$a_{\alpha\beta} = \frac{3\,\varepsilon_\beta}{r_p} \tag{15}$$

donde r_p es el radio de partícula (soporte inerte más "biofilm").

APLICACION DEL MODELO

Se plantea la aplicación del modelo al caso de un reactor de escala laboratorio de lecho expandido, para el que se dispone de información experimental publicada (Switzenbaum y Jewell, 1980) que permite una verificación de los resultados.

El esquema propuesto es un reactor con reciclo para mantener la expansión del lecho, constituida por partículas de alúmina de pequeño diámetro. El ingreso de material a tratar se realiza sobre la corriente del reciclo. Se utiliza una alimentación sintética que no tiene sólidos suspendidos, lo que es de interés ya que este parámetro indica la biomasa libre que genera el reactor.

Para este sistema, el aporte al flujo, en el interior del reactor, de la alimentación a tratar es prácticamente despreciable, por lo que se puede considerar: i) la fase líquida está saturada en biogas (la alimentación no contiene y el efecto de dilución es relativamente muy pequeño); ii) la fase sólida no se mueve ($v_x = 0$) por lo que la ecuación (10) se reduce a una ecuación algebraica. Esta última característica hace imprescindible la consideración de la muerte de microorganismos, como una forma de evitar inconsistencias (por ejemplo que necesariamente toda biomasa generada pasa a la fase líquida donde por hipótesis no se puede reproducir).

Las condiciones de contorno para el sistema de 3 ecuaciones diferenciales resultantes son:

$$S = \frac{Q_R\, S_{(z=L)} + Q\, S^0}{Q_R + Q} \quad , \quad z = 0 \tag{16}$$

$$X' = \frac{Q_R\, X'_{(z=L)}}{Q_R + Q} \quad , \quad z = 0 \tag{17}$$

$$v_G\, C_G = 0 \quad ; \quad z = 0 \tag{18}$$

Para los parámetros de operación del trabajo mencionado se presenta en la Figura 2 la relación del caudal de entrada al caudal de reciclo $\left(\rho = Q/(Q+Q_R)\right)$ en función del caudal de entrada. Como puede observarse el caudal de entrada no alcanza salvo para la condición extrema de máxima alimentación (o lo que es lo mismo máxima carga) al 3 % del caudal total en el lecho. Esto apoya la idea de saturación de biogas en el líquido y desvirtúa para estas condiciones el planteo de flujo pistón para

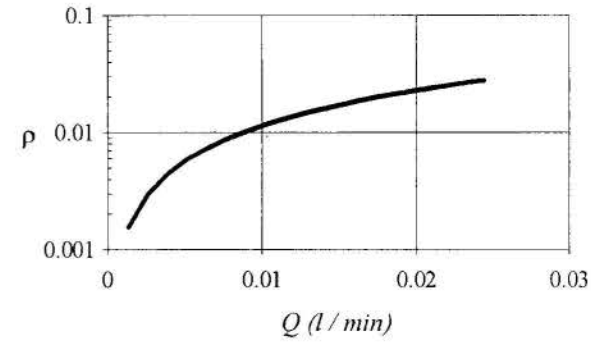


Figura 2 - Relación de reciclo en lecho suspendido (Datos de (Switzenbaum y Jewell, 1980))

el reactor. Esto no invalida el planteo que para casos con dimensiones más realistas debería resultar de utilidad.

Para el rango de operación analizado en el trabajo mencionado se han calculado utilizando el modelo propuesto dos parámetros característicos de este tipo de reactores: i) eficiencia de eliminación de materia orgánica, y ii) sólidos volátiles suspendidos a la salida del reactor. Este último se calcula en base a la concentración de biomasa suspendida (no soportada) afectándola de un coeficiente de conversión utilizado en el trabajo original (1mg sólido equivale a 1.42 mg DQO). Ambos parámetros fueron evaluados en función del tiempo hidráulico de retención (HRT). Como parámetros cinéticos se utilizaron datos promediados propuestos en un trabajo de revisión (Henze y Harremoës, 1983). Un compendio de los datos utilizados se presenta en la Tabla 1.

En la Figura 3 se presentan los resultados del modelo para los extremos de concentración de sustrato analizados en el trabajo original. Las líneas de trazos gruesas corresponden a una concentración de entrada de 0.2 mg/cm^3 y las líneas finas a una concentración de entrada de 0.6 mg/cm^3. Los resultados experimentales están destacados puntualmente (• para un S^0 de

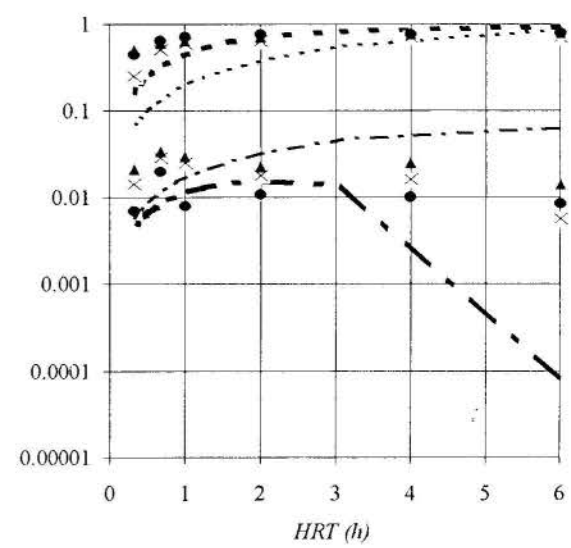


Figura 3 - Eficiencia de remoción de DQO y sólidos suspendidos en el efluente (Datos de (Switzenbaum y Jewell, 1980))

Tabla 1: Parámetros utilizados en el modelado.

Parámetro		Fuente
μ_x	0.4 (1/d)	(Henze y Harremoës, 1983)
K_p	0.05 (kg DQO/m^3)	
Y_x	0.03 (adim)	
b	0.003 (1/d)	
S^0	0.2-0.6 mg/cm^3	(Switzenbaum y Jewell, 1980)
T	30 C	
V_{lecho}	500 cm^3	
X	72 mg/cm^3	(Shieh, Sutton y Kos, 1981)

0.2 mg/cm^3, × para 0.4 mg/cm^3 y ▲ para 0.6 mg/cm^3). Se puede observar que para los dos parámetros calculados el modelo sigue las tendencias de los resultados experimentales. La eficiencia del proceso calculada resulta inferior a la experimental para tiempos cortos de retención . El modelo lógicamente predice eficiencias mayores para el caso de menor carga orgánica en el reactor (sustrato a la entrada mínimo). Es de hacer notar que se están usando parámetros cinéticos promediados para procesos similares y no datos específicos para el sistema dado. Las concentraciones de sólidos volátiles suspendidos (X' en el modelo presentado) muestran una tendencia general similar a la experimental. A bajos tiempos de retención crecen y luego decrecen suavemente. Considerando la evolución de la carga orgánica se puede inferir que a mayor carga orgánica (menor tiempo de retención hidráulico para una dada concentración) habrá mayor actividad orgánica y por lo tanto mayor producción de biomasa libre (la biomasa soportada está fija por las imposiciones del modelo). Para tiempos muy bajos de retención se observa un comienzo de "wash-out", se pierde relativamente más biomasa que la liberada por la mayor actividad del sistema. Nuevamente, si bien las tendencias están representadas adecuadamente, se observan discrepancias para tiempos cortos. Una adecuada determinación de parámetros debería mejorar los resultados obtenidos.

CONCLUSIONES

Se presentó un modelo general de reactor heterogéneo con biomasa soportada en un lecho suspendido para la degradación anaerobia de carga orgánica soluble, considerando un esquema cinético simplificado.

Utilizando promediación volumétrica se pueden identificar adecuadamente hipótesis de trabajo, y necesidades teóricas en el planteo mismo del modelo.

Se utiliza un modelo hidrodinámico para tener en cuenta la expansión del lecho, esto le da al modelo versatilidad frente a distintas variantes que se pueden presentar. Un estado no estacionario va a presentar una densidad de partícula variable, que afectará la expansión del lecho.

Se analizaron datos experimentales publicados para un reactor con reciclo a escala laboratorio. Para este caso se identificaron las hipótesis necesarias para representar el sistema. El modelo resultante de tipo flujo pistón, no es el más adecuado para la representación del mismo ya que se tiene mucho reciclo y se aproxima más a un reactor perfectamente mezclado (el modelo predice adecuadamente una variación axial muy baja).

Los resultados del modelo utilizando parámetros cinéticos promedios obtenidos de la literatura aproximan adecuadamente las tendencias mostradas por la conversión del reactor y su producción de sólidos volátiles suspendidos.

Un planteo generalizado como el mostrado puede utilizarse para analizar distintas variantes teórico-prácticas con una identificación rápida de las necesidades, por ejemplo en el desarrollo de experimentos y análisis de resultados para la determinación de parámetros cinéticos.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue financiado parcialmente con fondos de CONICET, PID-BID 3-0201-1006/92, y de UNL CAI+D 33-168.

REFERENCIAS

Henze M. y Harremoës P., 1983, "Anaerobic Treatment of Wastewater in Fixed Film Reactors - A Literature Review", Wat. Sci. Tech., Vol 15, pp. 1-101.

Negri E.D., Mata-Alvarez J., Sans C. y Cecchi F., 1993, "A Mathematical Model of Volatile Fatty Acids (VFA) Production in a Plug-Flow Reactor Treating the Organic Fraction of Municipal Solid Waste (MSW)", Wat. Sci. Tech., Vol 27, pp. 201-208.

Perry R.H. y Chilton C.H., Eds., "Chemical Engineer's Handbook. Fifth Edition", McGraw-Hill, New York.

Shieh W.K., Sutton P.M. y Kos P., 1981, "Predicting Reactor Biomass Concentration in a Fluidized-Bed System", J. WPCF, Vol. 53, pp. 1574-1584.

Switzenbaum M.S. y Jewell M.S., 1980, "Anaerobic Attached-Film Expanded-Bed Reactor Treatment", J. WPCF, Vol. 52, pp. 1953-1965.

Whitaker S., 1986, "Transport Processes with Heterogeneous Reaction", in *Concepts and Design of Chemical Reactors*, Whitaker S. y Cassano A.E., Eds., Gordon and Breach Science Publishers, New York.

ABSTRACT

MODELING OF SUSPENDED BED REACTORS FOR THE ANAEROBIC BIODEGRADATION OF LIQUIDS WITH HEAVY ORGANIC LOADS.

A general heterogeneous suspended bed reactor model for the anaerobic degradation of soluble organic matter is presented. The development of the equations based on the volume averaging of the balance equations is presented and discussed for a simplified reaction scheme. The behavior of the suspended bed is modeled independently by use of a hydrodynamic model. The model for a simplified case is presented and the hypothesis identified. Then it is used for the analysis of published experimental results. It is found that the behavior of the experimental results are validated using averaged kinetics information.

ABCM

EFFECTIVE DRAG COEFFICIENTS IN A PNEUMATIC BED WITH A SPOUTED BED TYPE SOLID FEEDING SYSTEM

E.M.V. Silva, J. Mazucheli, M.C. Ferreira e J.T. Freire
Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de São Carlos
13565-905 - São Carlos - SP - Brasil

SUMMARY

The one-dimensional model for gas-solids flow based on continuity and momentum equations using experimental data from voidage, pressure gradients and gas and solid superficial velocities was applied for obtaining the fluid-particle interphase drag coefficients in a pneumatic bed with a spouted bed solid feeding system. Different correlations for estimating the effective drag coefficient (C_d) were tested. The best fit was obtained using correlations similar to Uhlhlerr and Sinclair (1970) for C_d with new adjusted parameters.

INTRODUCTION

In the pneumatic bed developed by Ferreira and Freire (1992), a spouted bed type system was employed for feeding solids in the transport tube. Unlike the usual feeders (such as fluidized beds), it offers the possibility of operating over a wide range of solid flow rates, which may be varied by changing the gas flow rates and the distance between the air inlet and the lower end of the transport tube. Solids flow rates in pneumatic transport usually do not depend on the gas flow rates, such dependency being a particular characteristic of this feeder.

Regardless of the solid feeding system employed, analysis of fluid dynamics reported in the literature (Luo and Gidaspow (1991), Littman et al. (1993), Garic et al. (1995), Silva et al. (1996) and Ferreira et al. (1996)) usually employs the continuity and momentum equations for each individual phase, according to the classical model proposed by Capes and Nakamura (1973). The difficulties related to the solution of this model is the need of estimating the magnitude of the interaction forces, which are the fluid-wall and solid-wall friction and the drag force between fluid and solids.

In this work, a two-fluid model similar to that of Capes and Nakamura (1973) is employed to describe the gas-solid flow in the pneumatic bed with a spouted bed type solid feeding system. Experimental values of voidage (ε), pressure gradients (-dp/dz) and gas and solid flow rates were employed for estimating the drag forces on the flow. Fluid dynamics analysis of one-dimensional modeling was carried out by comparing the experimental values of (-dp/dz) and those predicted by the model. Several correlations for estimating the solid-wall friction forces and the drag forces were tested. Empirical parameters of some of the equations were estimated by a least squares method. The limitations inherent in the use of such correlations in pneumatic transport modeling are discussed based on the experimental results.

Fluid dynamics model

Capes and Nakamura (1973) considered pressure drops in both phases and neglected the term corresponding to the gravity loss of the fluid phase. The resulting equations for one-dimensional flow, steady state and non-accelerating region are:

$$\rho_f \varepsilon u = w_f \tag{1}$$

$$\rho_s (1-\varepsilon) v = w_s \tag{2}$$

$$\varepsilon (dP/dz) = -\beta (u-v)^2 + F_f + \varepsilon \rho_f g \tag{3}$$

$$(1-\varepsilon)(dP/dz) = \beta (u-v)^2 + F_s + (1-\varepsilon)\rho_s g \tag{4}$$

From a linear combination of (3) and (4), the momentum equation for the mixture is obtained

$$-(dP/dz) = \left[(1-\varepsilon)\rho_s - \varepsilon \rho_f\right] g + F_f + F_s \tag{5}$$

In the equations above, the fluid properties are considered constant, since their changes in the transport tube are not significant. Interaction forces between the particles are not considered, since in dilute phase transport the voidages are very high (greater than 0.980). So the only significant interaction forces are those of friction between solid-wall and gas-wall, and also the drag force between the gas and the particles. The friction forces are written in terms of friction factors, as in the equations below

$$F_f = 2 f_f \varepsilon \rho_f u^2 / D_t \tag{6}$$

$$F_s = 2 f_s (1-\varepsilon) \rho_s v^2 / D_t \tag{7}$$

It is assumed that the fluid dynamic drag force is proportional to the square of the slip velocity ($F_d = \beta(u-v)^2$) and that frictional losses can be estimated by considering individual losses from each phase. Thus the gas-wall friction factor (f_f) in two-phase flow is usually estimated through the equations proposed for a gas flowing

in a transport pipe without particles. In such case, it depends on both the Reynolds number and on the roughness of the pipe. Several correlations are proposed in the literature, such as Blasius or Colebrook, which yield very good predictions and have wide acceptance. Estimating the solid-wall friction factor (f_S) and the volumetric drag coefficient (β) is not straightforward and will be discussed separately in the following.

Solid-Wall Friction Factor

Many correlations are reported in the literature for predicting solid-wall friction factors (f_S), but large discrepancies are observed among expressions from different works. Some of the most common equations will be presented here. In Capes and Nakamura (1973), f_S is correlated as a function of the particle interstitial velocity only:

$$f_S = 0.048v^{-1.22} \tag{8}$$

The expression proposed by Yang (1978), in which f_S is a function of voidage, particle slip velocity and particle terminal velocity is usually more accepted. The author correlated experimental data reported in several works, and obtained the following equation, valid for $U/U_t < 1.5$.

$$f_S = 0.01025\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}\left(\frac{(1-\varepsilon)u_t}{u-v}\right)^{-1.021} \tag{9}$$

Marcus et al. (1990) also reports an equation proposed by Stegmaier (1978), which is written in terms of non-dimensional numbers:

$$f_S = 0.52\left(W_s/W_f\right)^{-0.3} Fr^{-1} Fr_v^{0.25}\left(d_p/D_t\right)^{-0.1} \tag{10}$$

Fluid-Particle Drag Coefficient

In the non-accelerating region of dilute pneumatic transport, the drag coefficient in a particle (β) can be related to the effective drag coefficient (C_d) in a individual particle by the equation obtained by Litman et al. (1993):

$$\beta = \frac{3(1-\varepsilon)\rho_f C_d}{4d_p} \tag{11}$$

In modeling pneumatic transport, the most common approach is to assume that the drag coefficients can be obtained from the standard drag curve (Arastoopour and Gidaspow, 1979). In some works, such as those of Yang (1973) and Gidaspow (1993), the effect of particle concentration is considered through the use of a correction term which is a function of the suspension voidage. Since voidages in pneumatic transport are close to one, however, the corrections provided are usually very small.

It is worth noting that the standard drag curve refers to the motion of a smooth sphere at constant velocity through an undisturbed fluid, while in pneumatic conveying particles are entrained generally in a turbulent fluid. There is evidence that the characteristics of turbulence in the gas stream, such as the relative turbulence intensity (I_R) and turbulence macroscale (λ_t) can affect C_d (Marcus et alii, 1990). Concerning the turbulence macroscale, Torobin and Gauvin (1961) found no effect of this parameter on drag, while Neve (1986) (in Littman et alii, 1993) found that λ_t is as important as I_R at high Re_p, particularly when the macroscale is of the order of the sphere diameter.

The intensity of turbulence is defined by Torobin and Gauvin (1961) as

$$I_R = \sqrt{u'^2}\Big/(u-v) \tag{12}$$

where u' is the axial component of the fluctuating gas velocity.

The authors reported a sharp drop in the drag coefficient with particle Reynolds numbers (Re_p) for a constant I_R. They found that the critical Reynolds number, $(Re_p)_{crit}$, defined as the Re_p in which $C_d = 0.3$, decreases from 2×10^5 at $I_R = 0$ to 400 at $I_R = 0.4$. Such a reduction in the drag coefficients was also reported by Littman et al. (1993), who estimated C_d from equation (11) using voidage values predicted by the one-dimensional model from Capes and Nakamura (1973), considering $F_S = 0$. Their data were obtained in a 2.81×10^{-2} m diameter transport pipe. Ferreira et al. (1996), who used experimental values of voidage in Eq. (11) for estimating C_d found similar results for a 5.34×10^{-2} m diameter transport pipe. In none of these works, however, I_R was either measured or even estimated for the prevailing experimental conditions.

Uhlherr and Sinclair (1970) proposed an expression which considers the effect of I_R for estimating C_d, valid in the range of $50 < Re_p < 700$ and $0{,}07 < I_R < 0.5$:

$$C_d = 0.133\left(1+150/Re_p\right)^{1.565} + 4I_R \tag{13}$$

The turbulence intensity for a single gas phase flowing in a pipe can be estimated through the correlation proposed by Lee (1987):

$$\frac{D_t u'}{\upsilon_f} = 0.2\left(\frac{UD_t}{\upsilon_f}\right)^{0.86} \tag{14}$$

It is expected however that the presence of particles affect I_R (Tsuji et al., 1984). In fact, Gore and Crowe (1989) showed that the turbulence intensity increases sharply for values of the parameter $d_p/l_e > 0.1$, where l_e is the characteristic length of the most energetic turbulent eddy when only fluid phase is present. The length of the most energetic eddy is calculated based on the work of Hutchinson et al. (1971), who observed that the l_e/D_t ratio across a pipe in fully developed turbulent flow is approximately 0.11, except near the wall. Theofanous and Sullivan (1982) derived the following expression for estimating the turbulent intensities in gas-liquid and gas-solid flows:

$$\left(\frac{u'}{u}\right)^2 = \left\{\frac{1}{2} f_f \varepsilon^2 + \gamma\varepsilon(1-\varepsilon)\left(1 - \rho_s/\rho_f\right)\frac{D_t g}{4u^2}\right\} * \left(1 + 1.5(1-\varepsilon)\frac{D_t}{d_p}\right)^{-1} \quad (15)$$

where γ is an empirical constant, estimated by the authors as being 4.5.

METHODOLOGY

Apparatus

A schematic diagram of the apparatus is shown in Figure 1. The spherical glass particles with ρ_p =2503 kg/m^3 and mean diameters equal to 1.00, 1.7, 2.05, 2.40 and 2.85 x10^{-3} m were transported in a galvanized iron pipe 4.2 m long and with internal diameter equal to 8.14 x10^{-2} m. Air to the system was supplied by a 20 HP blower and its volumetric flow rate was measured by means of an orifice plate flowmeter. After being pneumatically transported, the particles return through a standpipe with diameter equal to 10.48 x10^{-2} m. The solids flow rates were measured by diverting the flow and collecting the solids in the sample collector (3). The static pressures along the pipe were measured at seven points by pressure taps connected to U-type manometers. While in operation, the standpipe was kept filled with solids and the gas flowrates through it was estimated from Ergun equation, with the pressure drop measured between two points of the pipe. The gas flow rates in the transport pipe are then obtained from a mass balance which considered the difference between the air supplied by the blower and the air deviated through the standpipe.

The mean voidages at the transport pipe were measured by means of two pneumatically operated traps which closed off a 2.05 m long section of the pipe. The solids settled in the bottom trap were collected by a suction pump and subsequently weighted, providing the average voidage.

Theoretical Methodology

Fluid dynamics analysis of the flow in the non-accelerating region was carried out using the equations from Capes and Nakamura (1973) (Eqs. 1 to 4), including the gravity loss of fluid phase. The gas-wall friction factor (f_f) was obtained from the correlation proposed by Colebrook (1939), with an experimentally determined mean relative roughness. The estimates of solid-wall friction factors and drag coefficients were done using the functional relationships proposed in the empirical correlations previously presented, with their parameters readjusted by Gauss-Newton least squares method, using the experimental data. The validity of the parameters estimated were analyzed by checking the adjustment coefficient, R^2, the residual distribution between experimental and predicted values and bias (Seber and Wild, 1989) for the non-linear equations.

Once the expressions for predicting f_s and C_d were provided, the resulting system is a set of non-linear algebraic equations, which have been solved using a modified Newton-Raphson iterative method (Seber and Wild, 1989).

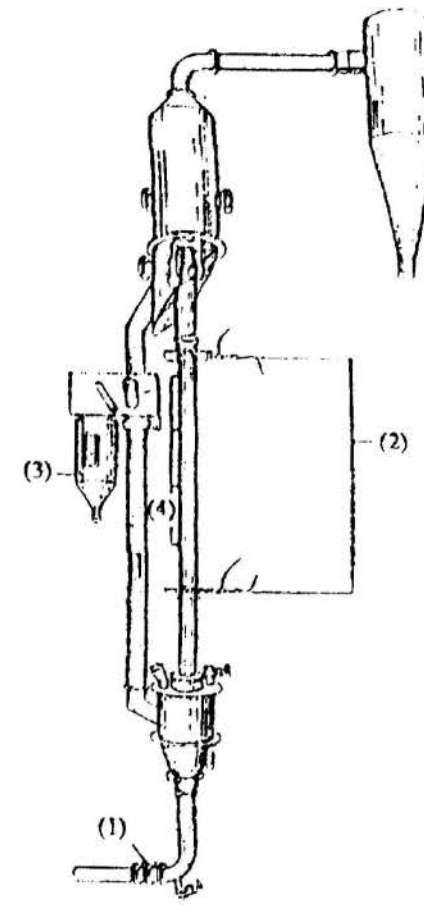


Figure 1 - A schematic diagram of the apparatus; (1) flow meter; (2) slip valves; (3) solids sampler, (4) pressure taps.

RESULTS AND DISCUSSION

Experimental values of the drag coefficients in the flow estimated from equations (3), (6) and (11) using the measured values of ε and (-dp/dz) are presented in Figure 2.

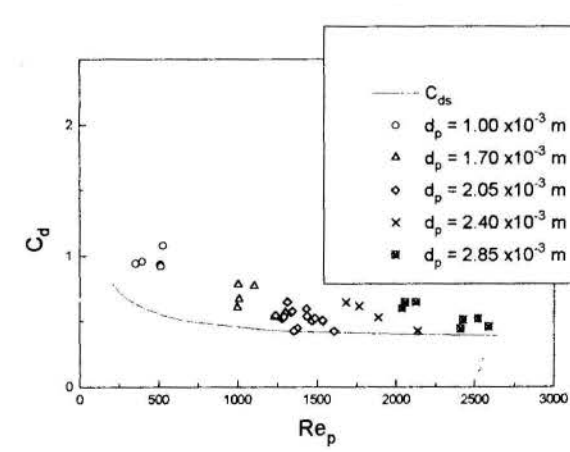


Figure 2 - Experimental drag coefficients vs. particle Reynolds numbers.

As can be seen, most of the data fall above the standard drag curve for the whole range of Re_p investigated, which varies from about 350 to 2700. The sharp drop of C_d to values well below the standard drag curve as reported by Littman et al. (1993) and by Ferreira et al. (1996) was not detected for the conditions of this work. It must be noted that the main shortcoming of Littman's methodology is that C_d is estimated using an equation derived from the model of Capes and Nakamura (1973) with the assumption of $F_s = 0$, which may be leading to unrealistic predictions. In fact, the use of our measured values of voidages in the equation suggested by Littman et al. (1993) did not provide good predictions of C_d, which have been consistently underestimated when compared to the values of Figure 2. Values of C_d above the standard drag curve were also reported by Garic et al. (1995) for particles of 1.2 and 2.98 $x10^{-3}$ m, in a range of Re_p varying from 400 to 4000.

Considering the equations investigated in the literature for estimating C_d, the only one to predict an increase of C_d to values above the standard drag curve was the correlation of Uhlherr and Sinclair (1970) (Eq. 13). Hence, this expression was chosen for calculating C_d in the model with empirical parameters adjusted for the experimental data. The turbulence intensities for the experimental conditions investigated in this work were first calculated from Eq. (15). It provided, however, very high values for I_R, resulting in C_d values far above the experimental ones. When that expression's parameters were estimated, convergence problems were observed in the mathematical procedure for estimating them, so they could not be evaluated for our experimental conditions. The turbulence intensities were then estimated from Eq. (14), derived for a gas flowing without particles. Considering the very low solids concentrations in the suspension (the experimental voidage varied in the range of 0.980 to 0.999), I_R may indeed be practically unaffected by the presence of particles. The equation adjusted, similar to that of Ulhlerr and Sinclair, is:

$$C_d = 0.428\left(1 + 150/\mathrm{Re}_p\right)^{2.935} + 4I_R \qquad (16)$$

The use of Eq. (13), with I_R estimated from Eq. (14), provided good results. No convergence problem was detected in the solution, and correlation coefficients were R^2 = 69.5 % for the adjusted correlation of C_d.

A possible reason for the bad estimates provided by Theofanous and Sullivan (1982) equation (Eq. 15) is that it predicts I_R increasing with increasing particle diameters, so the effect of the parameter d_p/l_e on I_R reported by Gore and Crowe (1989) is not considered and it could be important when I_R is lower than 0.1 (Clift e Gauvin, 1971). The values of I_R estimated from Eq. (14) were bellow this value.

For solving the theoretical model, a correlation like that of Yang (1978) was initially chosen for calculating the particle-wall friction factors, since it provided the best adjustments for the experimental data obtained in beds similar to ours, as reported in Ferreira et. al. (1996) and Garic et al. (1995). The equation adjusted for estimating f_s, again similar to that of Yang (1978) is

$$f_s = 0.006266\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3}\left(\frac{(1-\varepsilon)u_f}{u-v}\right)^{-1.139} \qquad (17)$$

with R^2 = 43.84%. A statistical analysis indicated that the residuals are randomly distributed but the biases of parameters is more than 1%, which doesn't represent a satisfactory value (Ratkowsky, 1990).

A comparison between the experimental values of (-dp/dz) and the predicted values obtained from the model solution using Eqs. (16) and (17) is shown in Fig. 3.

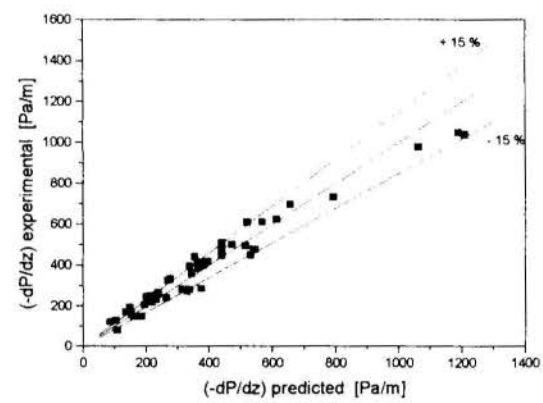


Figure 3 - Experimental vs. predicted gradient pressures. C_d calculated from Eq. (16) and f_s from Eq. (17).

As can be seen, the methodology provided excellent results and estimates the pressure gradients with mean deviations of ±15%, even with low R^2 obtained for Eq. (17).

For checking the different approaches from the literature for estimating C_d, values were also calculated using the equation for the standard drag curve proposed by Haider and Levenspiel (1989), including the empirical correction term suggested by Wen and Yu (1966), $C_d = C_{ds}\,\varepsilon^{-4.7}$. The statistical analysis of the predictions provided by such an expression, however, showed a non-random distribution of the residuals, indicating that the adjustment is not good.

In order to investigate the performance of correlations from the literature, the model was also solved using the correlation from Yang (1978) for f_s (Eq. 9) and two different equations for C_d: Eq. (15) from Ulhlerr and Sinclair and an expression from Haider and Levenspiel (1989) for the standard drag curve. In both cases, good estimates were obtained for the pressure gradients, as shown in Figure 4.

Most of the predictions have a mean deviation of ±20% when compared with the experimental data. The greatest deviations, which lay outside this range, were observed for the 1.00 $x10^{-3}$ m particles. It is interesting to note that the predictions of voidages and solid velocities using this methodology presented smaller deviations than those observed when the Eqs. (16) and (17) were applied.

The equations from Capes and Nakamura (1973) and from Stegmeier (1978) (in Marcus et al., 1990) for predicting f_s were also verified in the model, but they overestimated the pressure gradients whatever the equation employed for predicting C_d.

Particularly for the Stegmeier equation, such bad results are somewhat surprising. Because the non-dimensional numbers that appear on it seem to be physically consistent, a better adjustment to the experimental data was expected.

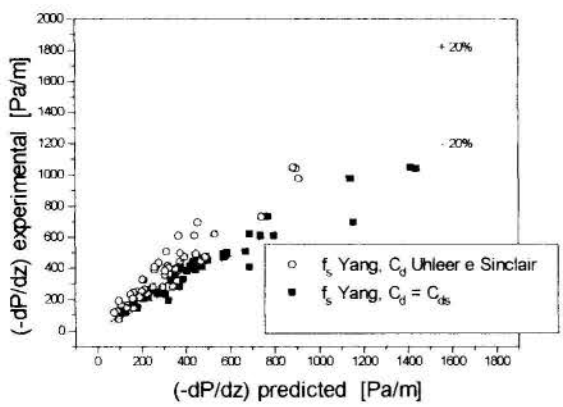


Figure 4 - Experimental vs. predicted pressure gradients.

CONCLUSIONS

The one-dimensional model for gas-solids flow based on continuity and momentum equations with experimental data of voidage, pressure gradients and gas and solid superficial velocities was applied for obtaining the fluid-particle interphase drag coefficients in a pneumatic bed with a spouted bed solid feeding system. Assuming that the particles behave as independent entities at the high voidages measured for the flow (from 0.980 to 0.999), the data of effective drag coefficient determined using experimental data of β and ε fall consistently above the standard drag curve, a behavior which has been also reported by Uhlherr and Sinclair (1970) for single-particle drag coefficients.

Theoretical values of pressure gradients were obtained from the model solution and compared to the experimental values. Correlations similar to that of Yang (1978) for estimating the solid-wall friction factor, and to that of Uhlherr and Sinclair (1970) for the effective drag coefficient, were adjusted to our experimental data. The predictions of (-dp/dz) using such adjusted correlations in the model provided excellent fit to the experimental data, with deviations of $\pm$ 15%. The use of the original correlations from Yang (1978) and from Uhlherr and Sinclair (1970) also provided good results, with deviations of $\pm$ 20%, except for the 1.00×10^{-3} m particles.

ACKNOWLEDGMENTS

The autors thank the Brazilian funding agencies, CNPq and PADCT/FINEP, for the financial support given for this work

NOMENCLATURE

C_d Effective drag coefficient for a single particle in a misture

C_{ds} Drag coefficient for a single particle from the standart drag curve

d_p Particle diameter, m

D_t Transport pipe diameter, m

f_f Fluid-wall friction coefficient

f_s Solid-wall friction coefficient

F_f Fluid-wall friction, Pa/m

F_s Solid-wall friction, Pa/m

Fr Froud number related to air velocity

Fr_v Froud number related to particle velocity

g gravitational acceleration, m/s^2

I_R Intensity of turbulence

p Static pressure, Pa

Re_p Reynolds number related to particle diameter

u Intersticial fluid velocity, m/s

u' Axial component of the fluctuating gas velocity, m/s

U Superficial fluid velocity, m/s

u_t Particle terminal velocity in an infinite medium, m/s

v Intersticial paticle velocity, m/s

W_f Fluid density flow rate in transport tube, kg/m^2s

W_s Solid density flow rate in transport tube, kg/m^2s

z Axial coordinate, m

Greek letters

β Fluid-particle interphase drag coefficient

ε Voidage of suspension in transport pipe

γ Constant of Eq. (15)

ν_f Kinetic viscosity of fluid, m/s^2

ρ_f Fluid density, kg/m^3

ρ_s Particle density, kg/m^3

REFERENCES

Arastoopour, H. and Gidaspow, D., 1979, "Vertical Pneumatic Conveying Using Four Hydrodinamic Models", Ind. Eng. Chem. Fundam., Vol. 18, no. 2, pp. 123-130.

Capes, C.E. and Nakamura, K., 1973, "Vertical Pneumatic Conveying: an Experimental Study with Particles in the Intermediate and Turbulent Flow Regimes", Can. J. Chem. Eng., Vol. 51, pp. 196-204.

Clift, R., Grace, J.R. and Weber, M.E., 1978, "Surface Effects, field gradients", In: Bubbles, Drops, and Particles, New York, Academic Press, pp. 264-269.

Colebrook, C.F., 1939, "Turbulent Flow in Pipes, With Particular Reference to the Transition Region Between the Smooth and Rough Pipes Laws", J. Inst. Civil Eng., Vol. 11, pp. 133-156.

Ferreira, M.C. and Freire, J.T., 1992, "Fluid Dynamics Characterization of a Pneumatic Bed Using a Spouted Bed Type Solid Feeding System", Can. J. Chem. Eng., Vol. 70, pp. 905-909.

Ferreira, M.C., Silva, E.M.V. and Freire, J.T., 1996, "Measurements of Mean Voidages and Fluid Dynamics Analysis in a Circulating Fluidzed Bed with a Spouted Bed Type Solid Feeding System", Brazilian Journal of Chemical Engineering, Vol. 13, pp. 29-39.

Garic, R.V.; Grbavcic, Z.B. and Jovanovic, S.Dj., 1995, "Hydrodynamics Modeling of Vertical Non-Acelerating Gas-Solids", Powder Technology, Vol. 84, pp. 65-74.

Gidaspow, D., 1993, "Multiphase Flow and Fluidization", Academic Press, New York, 467 p.

Gore, R.A. and Crowe, C.T., 1989, "Effect of Particle Size on Modulating Turbulent Intensity", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 15, pp. 279-285.

Haider, A. and Levenspiel, O., 1989, "Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Nonspherical Particles", Powder Technology, Vol. 58, p. 63-70.

Hutchinson, P., Hewitt, G. E Dukler, A.E., 1971, "Deposition of liquid or solid dispersion from turbulent gas streams: a stochastic model", Chem. Eng. Sci., Vol. 26, pp. 419-439.

Lee, S.L., 1987, "Particle Drag in a Dilute Turbulent Two-Phase Suspension Flow", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 13, n. 2, pp. 247-256.

Littman et al., 1993, "Modeling and Measurementof Effective Drag Coefficient in Decelerating and Non-Acelerating Turbulent Gas-Solids Dilute Phase Flow of Large Particles in a Vertical Transport Pipe", Powder Technology, Vol. 77, pp. 267-283.

Luo, K.M. and Gidaspow, D., 1991, "Computed Particle Hold-Up in a Vertical Pneumatic Conveying Line", Advanced Powder Technology, Vol. 2, pp. 255-264.

Marcus, R.D., Leung, L.S., Klinzing, G.E. and Rizk, F., 1990, "Pneumatic Conveying of Solids". 1.ed.Great Britain, Edmundsbury Press, 596p.

Ratkowsky, D.A., 1983, "Handbook of Nonlinear Regression Models", Marcel Dekker, New York, 350p.

Seber, G.A.F. and Wild, C.J. 1989, "Nonlinear Regression". New York, John Wiley & Sons, 368 p.

Silva, E.M.V., Ferreira, M.C. and Freire J.T., 1996, "Análise da Influência do Bocal de Entrada no Comportamento Fluidodinâmico do Leito Pneumático com Alimentador Tipo Jorrro", RBCM - J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences, Vol. XVIII, pp. 74-79.

Theofanous, T.G. and Sullivan, J., 1982, "Turbulent in Two-Phase Dispersed Flows", Journal Fluid Mech., Vol. 116, pp. 343-362.

Torobin, L.B. and Gauvin, W.H., 1961, "Fundamental Aspects of Solids-Gas Flow: Part V", Can. J. Chem. Eng., Vol. 37, pp. 189-199.

Tsuji, Y., Morikawa, Y. and Shiomi, H., 1984, "LDV Measurements of an Air-Solid Two-Phase Flow in a Vertical Pipe", Int. J. Multiphase Flow, Vol. 139, pp. 417-434.

Uhlherr, P.H.T. and Sinclair, C.G., 1970, "The Effect of Free-Stream Turbulence on the Drag Coefficient of Spheres". Proc. 6th Australasian Hydraulics and Fluid Mechanics Conference, Inst. Engrs. Australia, pp. 541-545.

Wen, C.Y. e Yu, Y.H., 1966, "Mechanics of fluidization", Chem. Eng. Prog. Symposium Series, Vol. 62, n. 62, pp. 100-111.

Yang, W.C., 1978, "A Correlation for Solid Friction in Vertical Pneumatic Conveying Lines", AIChE Journal, Vol. 24, pp. 548-552.

DISTRIBUIÇÃO DE PARTÍCULAS EM LEITOS VISCOSOS VIBRO-JORRADOS

André G. Pereira; Frederico Keller; José Roberto D. Finzer
Departamento de Engenharia Química
Universidade Federal de Uberlândia
38400-902 - Uberlândia-MG , Brasil

RESUMO

A tecnologia da vibração, juntamente com a fluidização, pode ser uma alternativa aos sistemas tradicionais de mistura presentes em operações unitárias como a cristalização. O presente trabalho vem mostrar a relação existente entre algumas das variáveis relevantes num sistema vibro-jorrado, bem como alguns resultados obtidos na cristalização de sacarose por resfriamento no dispositivo operacional.

INTRODUÇÃO

A operação unitária de cristalização assume uma posição proeminente dentro dos processos industriais que representam as atividades de grandes empresas e conglomerados envolvidos no recém-estabelecido mercado comum sulamericano. A tecnologia da vibração aplicada a tal operação, juntamente com a fluidização, pode trazer melhorias ao processo, e sua utilização poderia ser então uma alternativa aos sistemas tradicionais de mistura por agitadores rotativos ou por circulação externa da suspensão.

Pesquisas sobre a mecânica de leitos vibrados datam de 1940, quando Backmann propôs o primeiro modelo descrevendo o comportamento dinâmico de partículas sólidas em um leito verticalmente vibrado. Seguiram-se os clássicos estudos de Kroll (1954-55), porém o interesse sobre aplicações práticas de leitos vibrados surgiu após o trabalho de Chlenov e Mikhailow em 1964 e 1972, que usaram vibrações verticais como um meio de levitar um leito de partículas sólidas. Desde então, importantes operações industriais têm utilizado vibro-fluidização, sobretudo na secagem de sólidos granulares, o que envolve cerca de 90% de todas as aplicações (Thomas, 1988).

São poucos os estudos em sistemas sólido-líquidos vibrados voltados para operações de transferência de quantidade de movimento, calor e massa, e aplicáveis aos processos industriais.

No fenômeno da cristalização, os movimentos vibratórios imprimidos ao sistema influenciam a velocidade de crescimento, a forma e o número de cristais obtidos (Bouron, 1962).

Neste trabalho estuda-se a dinâmica de partículas sólidas dispersas em fase líquida em um leito vibro-jorrado, para obter-se subsídios aplicáveis em cristalização, culminando com a descrição dos primeiros resultados decorrentes da cristalização de sacarose.

CONCEITOS SOBRE A DINÂMICA DO LEITO

Os sistemas vibrados possuem dois subsistemas principais : o sistema excitado e o sistema excitante.

A conexão entre os dois sistemas é efetuada através de forças interativas.

Qualquer sistema que possui massa e elasticidade é capaz de vibrar. A Figura 1 pode ser utilizada para examinar o movimento de um sistema massa-mola submetido à oscilação livre (Thomson, 1978).

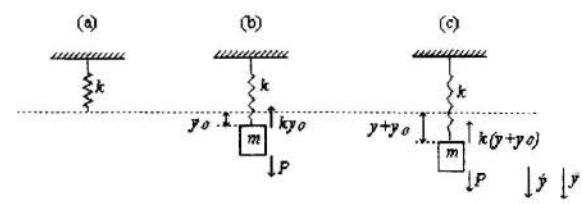


Figura 1. Sistema massa-mola.
(a) mola em repouso, (b) sistema massa-mola em equilíbrio estático, (c) sistema massa-mola submetido à oscilação livre.

Para um sistema com um grau de liberdade, quando o seu movimento é definido por apenas uma coordenada y, a freqüência natural de oscilação do mesmo, f_n , é expressa pela Eq. (1), onde τ é o período natural de oscilação e k é a constante de elasticidade da mola (Thomson, 1978).

$$f_n = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \tag{1}$$

A freqüência angular natural de oscilação é definida pela Eq. (2).

$$\omega_n = \frac{2\pi}{\tau} \tag{2}$$

Combinando (1) e (2), obtém-se a Eq.(3)

$$\omega_n = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{3}$$

Para os sistemas mais complexos utiliza-se o conceito de massa efetiva, devendo seu valor ser adicionado à massa concentrada m, surgindo então uma massa equivalente m_{eq}. Além disso, um sistema pode ser excitado por uma força periódica externa e, por fim, os casos reais sempre envolvem algum tipo de força de amortecimento.

O eixo mostrado na Figura 2 (identificado por C) é excitado por uma força harmônica $F(t)$. A equação do movimento aplicada a este será conforme a Eq. (4), onde F_d é a força de amortecimento, $\ddot{y}$ é a aceleração desenvolvida pelo eixo, e k é agora a rigidez equivalente do sistema mola-membrana.

$$m_{eq}\ddot{y} + F_d + ky = F(t) \tag{4}$$

O modelo de amortecimento viscoso indica que sua força é proporcional a velocidade do agitador, $\dot{y}$, sendo expressa pela Eq. (5).

$$F_d = C\dot{y} \tag{5}$$

É válido inferir aqui que a força de amortecimento depende da viscosidade do fluido contido no leito vibro-jorrado; portanto a constante C deve depender da viscosidade.

A força $F(t)$ é dada pela Eq. (6), onde F_0 é seu valor máximo e ω a freqüência angular da excitação.

$$F(t) = F_0 \operatorname{sen}(\omega t) \tag{6}$$

A solução da equação diferencial ordinária dada em (4) apresenta uma parte correspondente a equação homogênea e a parte particular devido ao termo não-homogêneo. A primeira parte é uma função oscilatória ou aperiódica, mas em ambos os casos anula-se rapidamente. Desta forma , no estado estacionário de vibração, a única contribuição é aquela da solução particular. Tal solução é da forma da Eq. (7), em que A é a amplitude de vibração conferida ao agitador e ϕ a defasagem desta vibração em relação à do agente excitador.

$$y = A \operatorname{sen}(\omega t - \phi) \tag{7}$$

Dos termos de (7) obtém-se a constante A , conforme dada pela Eq. (8).

$$A = \frac{F_0}{\sqrt{(k - m_{eq}\omega^2)^2 + (C\omega)^2}} \tag{8}$$

Substituindo em (8) a constante k a partir de (3), obtém-se a Eq. (9).

$$A = \frac{F_0}{\sqrt{m_{eq}^2(\omega_n^2 - \omega\ )^2 + (C\omega)^2}} \tag{9}$$

Quando a freqüência de vibração forçada ω coincide com a freqüência natural de oscilação ω_n, é atingida uma condição de ressonância. Nesta situação desaparece a primeira parcela do denominador da eq. (9), e o agitador do leito vibra com amplitude máxima, devido à máxima absorção de energia do sistema excitador.

Estes conceitos poderão ser utilizados na interpretação dos resultados obtidos nos experimentos com o equipamento de leito vibro-jorrado (Veras, Álvares, Finzer, 1994).

CRISTALIZADOR DE LEITO VIBRO-JORRADO E MÉTODOS EXPERIMENTAIS

O cristalizador de leito vibro-jorrado utilizado neste trabalho, assim como seus acessórios, estão esquematizados na Figura 2. O cristalizador (A) foi construído em aço inoxidável 304, chapa 18, e possui duas seções. A seção superior, de geometria cilíndrica, tem diâmetro e altura iguais, com valor de 0,24 m. A seção inferior apresenta geometria tronco-cônica, tendo altura de 0,18 m e diâmetro de 0,10 m em sua região mais estreita, onde foi acoplada uma membrana de 0,0032 m de espessura (B). A membrana possui função dupla, ou seja, esta mantém o material no interior do vaso de cristalização e transmite quantidade de movimento para o magma presente em suas imediações.

O mecanismo de vibração consta de um eixo vibratório (C) excitado por um excêntrico (D), que por sua vez é acionado por um motor elétrico (E). O motor está conectado a um variador eletrônico de velocidade (F), o que possibilita a variação da freqüência de vibração imposta ao sistema. O eixo (C) atravessa longitudinalmente o vaso e tem sua extremidade fixada no centro da membrana, dotando-a de um movimento oscilatório. A parte do eixo interna ao cristalizador contém 8 discos perfurados, com diâmetro variando entre 0,04 e 0,13 m, acoplados horizontalmente a ele, os quais agem também como propagadores das perturbações. Uma mola (N) disposta abaixo do excêntrico (internamente ao corpo do eixo) completa o dispositivo de vibração.

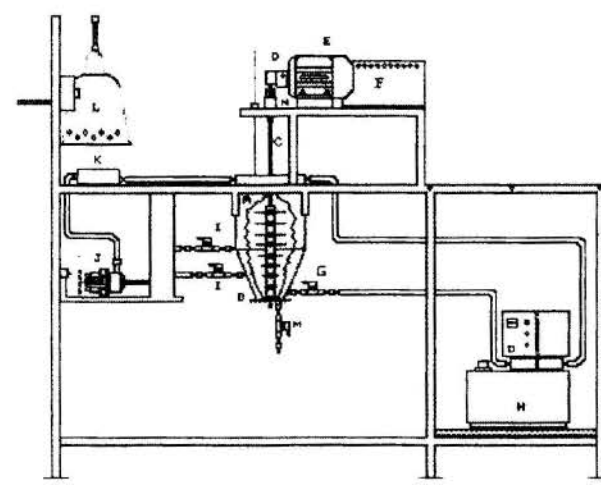


Figura 2. Esquema do cristalizador de leito vibro-jorrado e seus acessórios.

O cristalizador possui parede dupla , sendo disposta uma válvula (G) para introdução de água em sua camisa, visando a refrigeração do meio de cristalização de modo a manter a supersaturação, a qual é a força motriz para o desenvolvimento dos cristais. As válvulas (I) podem ser acopladas individualmente à bomba (J), possibilitando a retirada de magma do interior do vaso, sua passagem por um trocador de calor (K) aquecido por uma lâmpada que produz radiação

infravermelho (L) , e seu retorno ao topo do cristalizador. O objetivo desta instalação é destruir os núcleos eventualmente formados no interior do cristalizador; entretanto, tal aparato não foi colocado em operação neste trabalho. A válvula (M) localizada na base do vaso possibilita a retirada de amostras e a descarga de seu conteúdo ao término da operação.

A quantificação dos tamanhos dos cristais foi efetuada por peneiramento, utilizando-se (a) a série Tyler de peneiras para obtenção das sementes a partir do produto comercial, sendo selecionadas aquelas correspondentes a (-32 +35) malhas, ou seja, correspondes ao diâmetro médio de $4{,}56.10^{-4}$ m , e (b) um conjunto de pequenas peneiras desenvolvido para a separação de pequenas porções de magma, referentes às amostras extraídas do cristalizador.

Os parâmetros vibracionais do sistema excitador utilizados nos ensaios de cristalização propriamente ditos foram freqüência f de 9,5 Hz e amplitude A_{ex} de $7{,}6.10^{-3}$ m. É comum combinar-se estes parâmetros no número adimensional Γ, de acordo com a Eq. (10), onde $\omega = 2\pi f$ e g é a aceleração da gravidade. Neste caso obteve-se o valor de Γ = 2,8.

$$\Gamma = \frac{A_{ex}\omega^2}{g} \qquad (10)$$

A temperatura do meio de cristalização foi diminuída gradativamente, sendo monitorada em três posições no interior do cristalizador, a saber, (a) Ponto 1, a 0,16 m abaixo do topo e a 0,005 m da parede interna, (b) Ponto 2, a 0,16 m abaixo do topo e entre os discos, a 0,08 m da parede interna e 0,04 m do eixo, e (c) Ponto 3, a 0,09 m acima da base e a 0,005 m da parede interna. Nestas posições foram instalados termopares calibrados de cobre-constantan, e a medição da temperatura foi efetuada por um indicador eletrônico de sinais. Foi utilizado um banho termostatizado (H) para controle da temperatura do fluido refrigerante.

ESTUDOS DA DINÂMICA DO LEITO

Os estudos da dinâmica do leito visaram avaliar a relação das variáveis vibracionais do sistema excitador — especificamente a freqüência, sendo a amplitude mantida constante em $7{,}5.10^{-3}$ m — e das variáveis físicas — especificamente a viscosidade — do sistema fluido-partícula excitado, para com a efetividade na suspensão das partículas em meio ao fluido. As melhores condições operacionais seriam então utilizadas nos ensaios de cristalização. Nestes estudos foi utilizado um cristalizador geometricamente semelhante ao descrito na seção anterior, porém em escala reduzida de fator 0,63.

Inicialmente realizaram-se experimentos com a) um sistema resina fenólica-água; dispersando 0,010 kg da resina em 1,5 kg de água, cuja viscosidade na temperatura do experimento foi de $9{,}3.10^{-4}$ kg/m.s e b) um sistema resina fenólica - solução saturada de sacarose à 25 ^{0}C, correspondendo à concentração de 67 Brix. A viscosidade da solução nestas condições foi de $1{,}98.10^{-1}$ kg/m.s e sua densidade de 1330 kg/m^3 (Norrish, 1967). Foram dispersas 0,020 kg de resina em $1{,}5.10^{-3}$ m^3 de tal solução. O cristalizador operou com um tubo interno direcionador de fluxo ('draft tube'). Quantificou-se a concentração das partículas nas posições longitudinais A, B e C (conforme indicadas na Figura 5), sempre numa posição radial entre a parede e o tubo interno, para variados valores do adimensional Γ, utilizando-se a técnica de coleta de amostras. Os resultados são sintetizados nas Figuras 3 e 4 (Veras et al., 1994).

A análise das curvas da Figura 4 mostra que as mesmas estão mais próximas entre si quando comparadas com aquelas da Figura 3. O importante é que operando com Γ= 0,75, observa-se que as concentrações nas posições A, B e C quase se confundem e as mesmas se aproximam da média 0,013 g/ml (13 kg/m^3), que corresponde a condição de distribuição uniforme das partículas no meio. Surpreendentemente, isto indica uma tendência do leito vibro-jorrado possibilitar dispersões sólido-fluido mais uniformes operando com fluidos mais viscosos. A vibração promove o escoamento do fluido, o qual arrasta as partículas. A força da gravidade também atua sobre as partículas, entretanto a viscosidade do fluido retarda o escoamento das mesmas para a parte inferior do vaso.

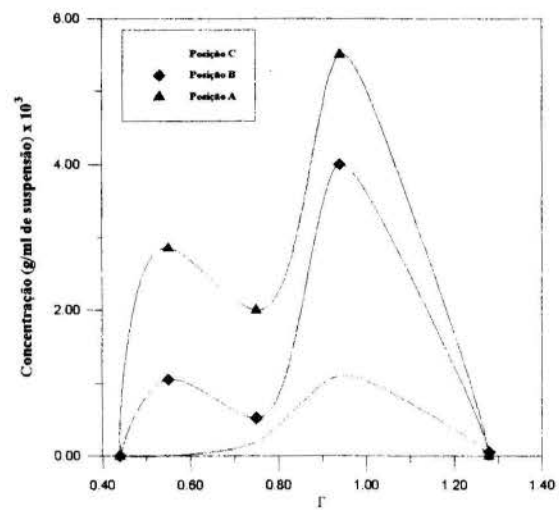


Figura 3. Concentração de resina fenólica em água em função do adimensional Γ (Veras et al., 1994).

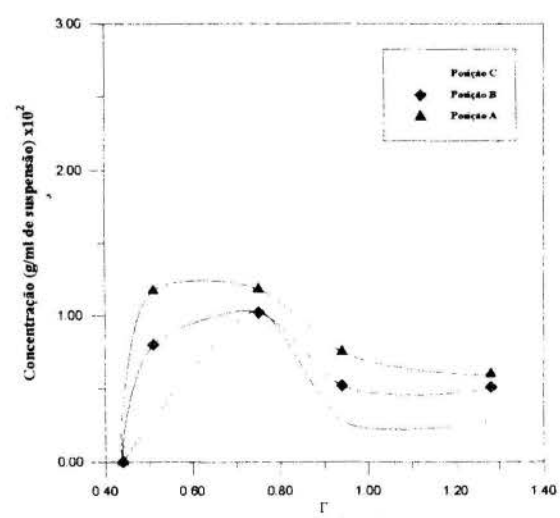


Figura 4. Concentração de resina fenólica em solução saturada de sacarose em função do adimensional Γ (Veras et al. 1994).

Como a transferência de vibração é periódica a resultante final é no sentido de manter as partículas em suspensão. Comparando o valor adimensional $\Gamma = 0,75$ com o otimizado do sistema aquoso, $\Gamma = 0,94$ (o qual possibilitou a obtenção de maiores concentrações de partículas), o menor valor do primeiro implica em menor consumo energético para a promoção da homogeneização do sistema.

Posteriormente foi realizado um ensaio num sistema constituído de um fluido diferente, o qual foi excitado numa faixa de freqüência bastante ampliada, objetivando com isso mostrar que o comportamento das partículas no leito vibro-jorrado é, definitivamente, bastante dependente das condições de ressonância (tais condições referem-se aos valores máximos das curvas concentração-Γ, conforme mostrado por Finzer e Kieckbusch (1992) para um leito vibro-jorrado gás-sólido).

Desta forma, um volume de $2,1.10^{-3}$ m^3 de solução de glicerina comercial misturada com 0,012 kg de resina fenólica, formando uma dispersão de concentração 5,5 kg/m^3, foi colocado no vaso de cristalização. A viscosidade desta solução era igual a $1,62.10^{-1}$ kg/m.s (quantificada utilizando o método de uma esfera em escoamento em regime laminar) na temperatura de 28 ^{0}C. O ensaio foi efetuado sem o tubo interno. A observação do escoamento na região anular, induzido pela vibração, mostrou que as partículas da resina fenólica deslocavam-se para o topo do leito nas proximidades da parede e descendiam pela região próxima aos discos horizontais. O escoamento da dispersão, conforme avaliado visualmente, está representado qualitativamente na Figura 5.

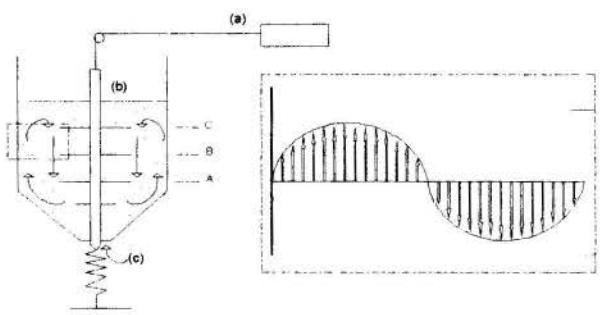


Figura 5. Leito vibro-jorrado e escoamento da dispersão.

Ao longo do ensaio, a vibração foi interrompida por 8 minutos antes de serem modificadas as condições operacionais. Após o início do escoamento sob cada condição, aguardou-se 4 minutos para que o sistema alcançasse a condição de estado estacionário, sendo em seguida efetuada a retirada de amostras das regiões A, B e C, por meio de uma sonda.

A sonda foi posicionada verticalmente e adjacente à parede cilíndrica do leito vibro-jorrado. A sonda de geometria cilíndrica, com diâmetro externo de 0,01 m, possuía um orifício central com diâmetro de 0,002 m, por onde eram coletadas as amostras. Portanto o centro do orifício de coleta estava disposto a 0,004 m da parede cilíndrica. Os resultados obtidos são mostrados na Figura 6.

As curvas da Figura 6 indicam que, ao operar-se com valores baixos de Γ (de 0 até 0,4), a concentração das partículas nos pontos A, B e C é muito pequena, da ordem de 7% da concentração do meio se a distribuição das partículas fosse uniforme. Ocorre um aumento gradativo da concentração com o aumento do adimensional, sendo o valor máximo correspondente a $\Gamma = 0,86$. Nesta situação a concentração máxima das partículas correspondendo ao ponto A é cerca de 82% daquela que ocorreria se as partículas estivessem uniformemente distribuídas. Nos estudos anteriores foi mostrado que, com o aumento da viscosidade do meio, o valor do parâmetro Γ, correspondente à condição de concentração máxima, diminuía com o aumento da viscosidade do meio (Figuras 3 e 4). No estudo em questão, a viscosidade da solução de glicerina, igual a $1,62.10^{-1}$ kg/m.s, é inferior à da solução de sacarose, de $1,98.10^{-1}$ kg/m.s. A primeira condição de máximo da Figura 6 situou-se entre os valores $\Gamma = 0,75$ e $\Gamma = 0,94$, indicando coerência nos resultados, em termos da influência da viscosidade do meio. Após a primeira condição de máximo existem, no intervalo de Γ estudado, dois outros máximos e três situações de concentrações mínimas. Isto mostra que o comportamento da dispersão é fortemente dependente das condições de ressonância.

É oportuno ressaltar que as curvas para o sistema resina fenólica-solução de glicerina , correspondentes as regiões A, B e C, são bastante próximas entre si, algo que não ocorre para os meios menos viscosos. Convêm observar ainda que a solução de sacarose possui uma densidade ligeiramente superior a da glicerina comercial, e que, na operação atual, o leito vibro-jorrado estava desprovido do tubo interno.

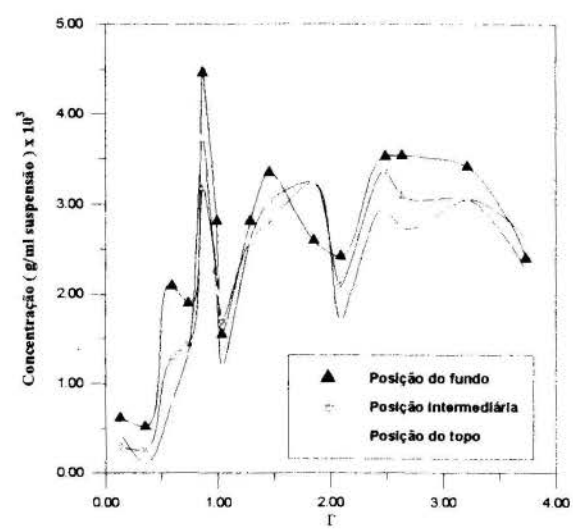


Figura 6. Concentração de resina fenólica em solução de glicerina comercial em função do adimensional Γ.

Finalmente realizado um experimento com solução de glicerina como fluido e novamente sem o tubo interno, operando-se com $\Gamma = 0,86$, com o objetivo de quantificar as concentrações de resina em diferentes posições radiais da região anular (região compreendida entre a parede do leito vibro-jorrado e os discos horizontais circulares dispostos na região central). Os resultados obtidos estão denotados na Figura 7, onde a abcissa representa o adimensional R/R_0 , sendo R_0 o raio da parte cilíndrica do leito vibro-jorrado.

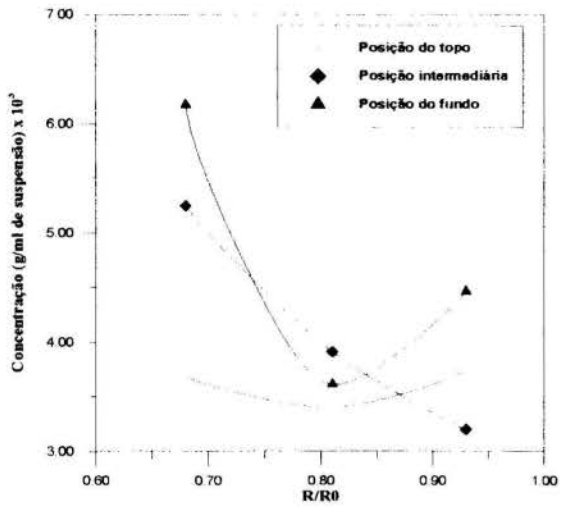


Figura 7. Concentração de resina fenólica em solução de glicerina comercial em função da posição radial na região anular do leito vibro-jorrado (Γ = 0,86).

As concentrações nas proximidades da parede são as mesmas daquelas da Figura 6, e as curvas mostram uma tendência de aumento da concentração nas proximidades dos discos circulares. Isto sugere que o escoamento sofre mais a influência da parede do leito vibro-jorrado, onde o arraste das partículas é dificultado. Na proximidade dos discos a resistência ao movimento não é contínua, como na proximidade da parede e, além disto, os discos estão em movimento vibratório. O resultado final é a ocorrência de maiores concentrações junto aos discos, as quais são também superiores àquelas da região central do espaço anular, sendo que estas últimas mostram pequena variação para as posições A, B e C entre si.

CRISTALIZAÇÃO EM LEITO VIBRO-JORRADO

Uma solução de sacarose em água foi preparada objetivando sua condição de saturação à temperatura de 60 °C. Foram adicionados 12,16 kg de sacarose comercial (açúcar refinado granulado, marca União) em 4,23 kg de água . A dissolução foi efetuada em um recipiente de alumínio, promovendo-se o aquecimento por chama direta de um queimador de GLP. A solução foi transferida ao cristalizador à temperatura de 62 °C e, ao alcançar 60 °C, 0,010 kg de semente foi distribuído sob a superfície livre da solução, instante que corresponde ao tempo inicial. A evolução da temperatura está representada na Figura 8. A curva obtida é válida simultaneamente para as três posições de controle, uma vez que a temperatura à cada instante foi praticamente idêntica para tais pontos entre si, ou seja, esta pode ser tomada como uniforme dentro do leito. Observa-se ainda que sua variação temporal foi aproximadamente linear.

Durante a operação de cristalização foram efetuadas descargas pela válvula (M), sendo que em cada descarga aproximadamente 8.10^{-5} m^3 de magma foi recolhido em 8.10^{-5} m^3 de álcool etílico 96 °GL. Este composto permite a diminuição da viscosidade do magma e a lavagem dos cristais com a extração da solução de sacarose aderida a eles, fatores que beneficiam a operação de peneiramento; porém este procedimento provoca a precipitação de todo o soluto, gerando partículas finas. Esta mistura heterogênea foi então introduzida no jogo de peneiras pequenas (12, 14, 18, 20, 28, 35 e 45 malhas, mais o fundo) e, após isto, outra porção deste mesmo álcool foi introduzida imediatamente acima de cada peneira, em sucessivas operações em que foi-se desmontando o jogo de peneiras, a partir da de malha 12 e até a de malha 45. Desta forma uma quantidade total de 3.10^{-4} m^3 de álcool percolou as peneiras, arrastando as partículas finas, impedindo-as de formar aglomerados e promovendo uma boa classificação dos cristais. Esta metodologia foi utilizada, com todos os seus pormenores, apenas para a classificação da quinta e última amostra, recolhida após 6,25 horas de cristalização. Após esta separação, as peneiras foram colocadas em estufa com circulação de ar à temperatura de 60 °C, por 30 minutos, visando a eliminação do álcool etílico retido na superfície dos cristais por ocasião da lavagem.

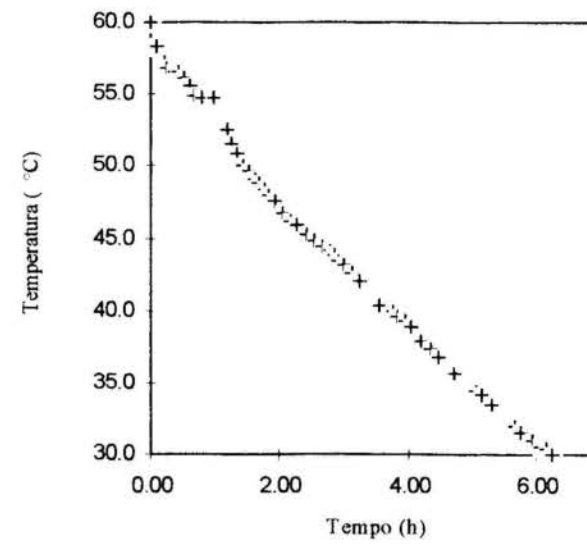


Figura 8. Temperatura do magma no interior do cristalizador em função do tempo.

Os resultados obtidos na classificação de 0,11 kg de amostra de magma recolhido ao final da cristalização são denotados na Tabela 1. Nesta tabela, a primeira coluna apresenta o par de peneiras que categoriza cada fração, sendo que os números são simultaneamente a denominação destas e seu número de malhas. A última coluna avalia a relação volumétrica entre os cristais formados e as sementes.

Tabela 1. Análise granulométrica dos cristais obtidos ao final da operação e dados correlatos.

Peneiras	Massa retida (kg).10^3	Tamanho médio (m).10^3	$\frac{V_{cristais}}{V_{sementes}}$
-12+14	-	1,428	30,7
-14+18	0,06	1,134	15,4
-18+20	0,11	0,973	9,7
-20+28	0,81	0,776	5,6
-28+35	0,12	0,559	1,8
-35+45	0,12	0,415	0,8

A análise dos resultados da Tabela 1 mostra que os maiores cristais apresentam volume 15,4 vezes o das sementes adicionadas, os de tamanho dominante cresceram 5,6 vezes e os menores cristais atingiram 0,8 vezes o volume das sementes. É

improvável que a nucleação espontânea tenha possibilitado o desenvolvimento de novos cristais, de forma que estes se aproximassem do tamanho das sementes. O mais verossimil é que se trate da existência de partículas menores retidas junto às sementes, ou que tenha ocorrido a dissolução parcial das sementes ao serem adicionadas no cristalizador, desde que a temperatura inicial de 60 °C era o limite de solubilidade. Por se tratar de sacarose comercial é provável que o comportamento de sua solução se afaste daquele da solução da substância pura.

CONCLUSÕES

A influência da freqüência vibracional e da viscosidade do fluido no grau de homogeneização do sistema sólido-fluido manifestou-se claramente, sendo que este grau guarda uma relação periódica com a primeira variável enquanto é diretamente afetada pelo segundo parâmetro. Além disso, a freqüência ótima de vibração, dentro da faixa estudada, parece estar inversamente relacionada à viscosidade do fluido. Tais conclusões serão submetidas à prova quando da realização de alguns experimentos análogos com a utilização do equipamento de maior escala, o que já está planejado e fornecerá o subsídio definitivo para as operações de cristalização futuras.

A dimensão das partículas é uma variável decisiva no efeito homogeneizador do sistema vibracional. Desta forma ensaios posteriores serão realizados com o intuito de avaliar esta relação. Uma conclusão neste sentido possibilitará a melhor manipulação do cristalizador, uma vez que este é dotado de tomadas de reciclo ao longo do leito. A captação de magma contendo grande quantidade de partículas finas — muitas vezes surgidas pela ocorrência de nucleação — , a destruição destas partículas mediante a passagem da suspensão por um trocador de calor, e a realimentação do magma no topo do leito, é de grande valia para a obtenção de um produto de qualidade.

A operação de cristalização, com a utilização de sementes de sacarose de diâmetro $4{,}56.10^{-4}$ m , possibilitou, em 6,25 horas, o crescimento dos cristais até cerca de 15 vezes o volume inicial das sementes, sendo que os cristais de tamanho dominante cresceram 5,6 vezes. Os cristais de tamanho dominante encontrados no açúcar refinado granulado da marca União apresentam dimensões de 1,428 ; 1,134 ; 0,973 e $0{,}776.10^{-3}$ m , participando com as frações mássicas de 0,232 ; 0,224 ; 0,245 e 0,240 , respectivamente. O tamanho dominante dos cristais obtidos neste experimento corresponde à dimensão inferior indicada acima, mostrando que, com 6,25 horas de cristalização, a massa mais expressiva de cristais formados situa-se dentro da faixa comercial. Novos estudos serão realizados para verificar a influência da diminuição mais lenta de temperatura do magma, da introdução de maior massa de sementes, e da instalação de um tubo interno ('draft tube') que aperfeiçoe a dinâmica do leito.

BIBLIOGRAFIA

Bouron, A. e Bouron, L.,1962, " Calcul et Disposition des Appareils de Cristallisation "Paris, Librairie Polytechnique C. H. Béranger. 463 p.

Finzer, J. R. D. e Kieckbusch, T. G., 1992. "Performance of an Experimental Vibro-Spouted Bed Dryer". *Drying 92*. A. S. Mujumdar, Elsevior Science Publishers, Volume A, Pg. 762-772.

Norrish, R. S., 1967. "Selected Tables of Physical Properties of Sugar Solutions". The British Food Manufacturing Industries Research Associations.

Thomas, B. , Liu, Y. A. , Mason, M. O. , E Squires, A. M. 1988. "Vibrated Beds : New Tools for Heat Transfer". *Chemical Engineering Progress*. Vol. 6, pp. 65-75.

Thomson, W. T. 1978. "Teoria da Vibração com Aplicações". Rio de Janeiro. Interciência.

Veras, M. H. D. , Álvares, M. M., e Finzer, J. R. D. 1994. "Influência da Vibração na Distribuição das Partículas em um Leito Vibro-Jorrado". *Anais do XXII Encontro Sobre Escoamento Em Meios Porosos*. Florianópolis. Vol. I, pp. 395-402.

ABSTRACT

The unit operation of crystallization is situated in an outstanding position within the industrial processes concerning the activity of important companies involved in the just stablished southamerican common trade. The technology of vibration applied to such an operation, together with fluidization, may bring improvements to the process, and its use could be an alternative to the standard ways of promoting mixture, that is, by rotative propellers or by external circulation of magma. The present study shows the relationship that exists between some of the relevant parameters in a vibro-spouted system, as well as some results achieved in the cooling crystallization of sucrose in such a kind of bed.

Este trabalho contou com o auxílio do CNPq. Processo 510083/93-5.

DESEMPENHO TÉRMICO DE REGENERADORES DE CALOR NÃO ADIABÁTICOS

Samuel Luporini[(1)], João A. F. R. Pereira[(2)] e Alberto L. de Andrade[(2)]
[(1)]Mestrado em Engenharia Química - UFBA
40210-630 - Salvador - BA - Brasil
[(2)]Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos - FEQ - UNICAMP
13081-970 - Campinas-SP - Brasil

RESUMO

Muitos modelos matemáticos tem sido apresentados para a simulação de regeneradores de calor, principalmente considerando o processo adiabático. No presente trabalho é apresentado um modelo que inclue a armazenagem de calor nas paredes, bem como as perdas de calor, que são muito importantes em determinadas situações. As equações diferenciais deste modelo são resolvidas empregando a representação trapezoidal da diferencial. Os resultados da simulação são comparados com os dados experimentais, e permitem determinar as condições operacionais em que aqueles efeitos são reduzidos.

INTRODUÇÃO

Regeneradores de calor são equipamentos utilizados para transferência de calor entre dois fluidos utilizando um leito fixo para a armazenagem intermediária de calor. A operação deste equipamento é cíclica, compreendendo o período de aquecimento, onde o gás quente escoa sobre o leito frio, seguido pelo período de resfriamento, onde o gás frio escoa sobre o leito quente. Esta operação ocorre sucessivamente, sendo que a partir de um determinado ciclo as temperaturas serão iguais as do ciclo anterior, atingindo-se o "equilíbrio cíclico".

Sistemas de regeneradores tem sido utilizados nas indústrias a um longo tempo, e muitos modelos matemáticos são baseados na suposição adiabática, sugeridos por autores como Willmott (1964, 1969) e Handley e Heggs (1969), onde não ocorre perdas de calor pela parede. Para este sistema, a teoria prediz que as eficiências no período de aquecimento e resfriamento são iguais no equilíbrio cíclico. Porém os resultados experimentais, segundo Hargraves et al. (1984) e Luporini (1994), mostraram claramente diferenças entre as eficiências.

As diferenças entre as eficiências observadas nos experimentos segundo vários autores (Heggs e Foumeny, 1986) seriam devido aos efeitos combinados da capacidade calorífica da parede e das perdas de calor pelas vizinhanças.

A magnitude das diferenças entre as eficiências do período quente e frio depende de vários fatores como a diferença das temperaturas interna e externa, o isolamento e a espessura da parede do regenerador.

Na literatura existem alguns modelos não adiabáticos sendo de destaque o modelo da capacidade térmica da parede desenvolvido por Heggs e Foumeny (1986) . No presente trabalho, este modelo é resolvido pelo método trapezoidal da diferencial, e comparado com os resultados experimentais (Luporini, 1994) e com o modelo adiabático, considerando o processo em escoamento contracorrente.

MODELO MATEMÁTICO

As equações diferenciais parciais são obtidas através dos balanços de calor para o fluido, o recheio, a parede do regenerador e a isolação externa, para um incremento dy do comprimento do regenerador durante um incremento de tempo $d\theta$ dentro de um período, como mostrado na figura 1. Estas equações são apresentadas na forma adimensional, com as seguintes suposições:

- As propriedades do sistema sólido e fluido são constantes.
- A velocidade do fluido não varia ao longo do leito.
- As temperaturas de entrada do fluido são constantes nos períodos de aquecimento e resfriamento.
- O perfil de velocidade do fluido é uniforme.
- Ocorre boa mistura da fase fluido e a troca de calor é desprezível entre a parede do regenerador e o recheio.
- O coeficiente de transferência de calor é constante.
- Não ocorre gradiente térmico dentro das partículas.
- A condutividade térmica do fluido é desprezível.
- A parede do regenerador é metálica, e sua capacidade calorífica é equivalente a do recheio, enquanto que a capacidade térmica de isolação é sómente uma fração dos dois. Assim não ocorre gradiente térmico radial na parede e na isolação devido a alta condutividade térmica do material predominante (parede metálica).

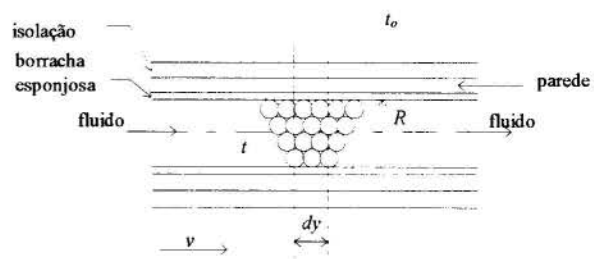


Figura 1 - Balanço de calor num elemento do leito

As coordenadas da figura 1 são adimensionalizadas da seguinte forma:

$$L = \frac{hA}{Gc_g} y \qquad \text{(comprimento adimensional)} \qquad (1)$$

$$z = \frac{hA}{M_s c_s} \theta \qquad \text{(tempo adimensional)} \qquad (2)$$

As equações adimensionalizadas, descritas por este modelo são as seguintes:

$$\frac{\partial f}{\partial L} = -(f - F) - A_w(f - F_w) \qquad (3)$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = f - F \qquad (4)$$

$$\frac{\partial F_w}{\partial z} = B_w(f - F_w) - C_w F_w \qquad (5)$$

onde: f, F e F_w são as temperaturas na forma adimensionalizadas = $(temp - t_o)/(t_{a1} - t_o)$, e $temp = t, T, T_w$, respectivamente, sendo:

t = temperatura do fluido (°C, K)
T = temperatura do recheio (°C, K)
T_w = temperatura da parede (°C, K)
t_o = temperatura ambiente (°C, K)
t_{a1} = temperatura de entrada do gás quente (°C, K)

$$A_w = \frac{h_i A_i}{hA}\ ;\ B_w = \frac{M_s c_s}{\rho_w c_{pw}} \frac{h_i A_{iw}}{hA}\ ;\ C_w = \frac{M_s c_s}{\rho_w c_{pw}} \frac{h_o A_{ow}}{hA}$$

onde:

A = área de transferência de calor por unidade de volume do leito (m^2/m^3)
A_i = área da superfície da parede interna por unidade de volume do leito (m^2/m^3)
A_{iw} = área da superfície da parede interna por unidade de volume da parede (m^2/m^3)
A_{ow} = área da superfície da parede externa por unidade de volume da parede (m^2/m^3)
c_s = capacidade calorífica do recheio (J/kg.K)
c_{pw} = capacidade calorífica da parede (J/kg.K)
c_g = capacidade calorífica do fluido (J/kg.K)
G = fluxo mássico do fluido ($kg/m^2.s$)
h = coeficiente de transferência de calor fluido/recheio ($W/m^2.K$)
h_i = coeficiente de transferência de calor fluido/parede ($W/m^2.K$)
h_o = coeficiente de transferência de calor externo ($W/m^2.K$)
M_s = densidade do leito = $\rho_s(1-\varepsilon)$ (kg/m^3)
ρ_s = densidade do material do recheio (kg/m^3)
ρ_w = densidade da parede (kg/m^3)
ε = fração de vazios
θ = tempo (s)

Com as seguintes condições iniciais e de contorno:

1) As temperaturas de entrada do gás no aquecimento e resfriamento são constantes:

$$f_{a1} = \frac{t_{a1} - t_o}{t_{a1} - t_o} = 1{,}0 \qquad \text{no aquecimento e}$$

$$f_{r1} = \frac{t_{r1} - t_o}{t_{a1} - t_o} = \text{constante} \qquad \text{no resfriamento}$$

onde os subscritos: a = aquecimento, r = resfriamento, 1 = entrada e 2 = saída

2) As temperaturas da fase sólida para o início do primeiro período são constantes, mas para os inícios dos períodos que sucedem elas são as mesmas do término do período anterior, ou seja:

$F(L,0) = F_w(L,0) = F_{si} = f_{r1}$ para o início do primeiro período e

$F(L,0) = F'(\Lambda - L, \Pi)$; $F_w(L,0) = F_w'(\Lambda - L, \Pi)$ para os períodos que sucedem, onde as aspas significam término do período anterior, a inversão no comprimento do regenerador é devido ao escoamento contracorrente.

onde: $\Pi = \dfrac{hAP}{M_s c_s}$ é o período reduzido,

$\Lambda = \dfrac{hAY}{Gc_g}$ o comprimento reduzido,

P = período (s) e
Y = comprimento do regenerador (m)

MÉTODO DE SOLUÇÃO

As equações (3), (4) e (5), são integradas utilizando o método trapezoidal (Willmott, 1964). Estas quando resolvidas produzirão os valores das temperaturas do gás e do sólido espaçados a uma distância ΔL em intervalos de tempo Δz, os quais são convenientemente representados pela rede da figura 2, os sufixos r e s se referem a distância axial e ao tempo, respectivamente.

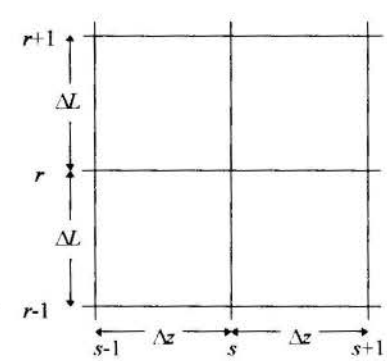


Figura 2 - rede numérica

Empregando o método trapezoidal, a forma diferencial destas equações são:

$$f(r+1,s) = f(r,s) + \frac{\Delta L}{2}\left\{ \left.\frac{\partial f}{\partial L}\right|_{r+1,s} + \left.\frac{\partial f}{\partial L}\right|_{r,s} \right\} \qquad (6)$$

$$F(r,s+1) = F(r,s) + \frac{\Delta z}{2}\left\{ \left.\frac{\partial F}{\partial z}\right|_{r,s+1} + \left.\frac{\partial F}{\partial z}\right|_{r,s} \right\} \qquad (7)$$

$$F_w(r,s+1) = F_w(r,s) + \frac{\Delta z}{2}\left\{ \left.\frac{\partial F_w}{\partial z}\right|_{r,s+1} + \left.\frac{\partial F_w}{\partial z}\right|_{r,s} \right\} \qquad (8)$$

As substituições das equações:

$$\left.\frac{\partial f}{\partial L}\right|_{r,s} = -\left[f(r,s) - F(r,s)\right] - A_w\left[f(r,s) - F_w(r,s)\right] \quad (9)$$

$$\left.\frac{\partial F}{\partial z}\right|_{r,s} = f(r,s) - F(r,s) \quad (10)$$

$$\left.\frac{\partial F_w}{\partial z}\right|_{r,s} = B_w\left[f(r,s) - F_w(r,s)\right] - C_w F_w(r,s) \quad (11)$$

nas equações (6), (7) e (8), respectivamente, ficam:

$$f(r+1,s) = A_1 f(r,s) + A_2\left[F(r+1,s) + F(r,s)\right] + A_3\left[F_w(r+1,s) + F_w(r,s)\right] \quad (12)$$

onde: $A_1 = \dfrac{(1-\alpha-\alpha A_w)}{(1+\alpha+\alpha A_w)}$; $A_2 = \dfrac{\alpha}{(1+\alpha+\alpha A_w)}$

$A_3 = \dfrac{\alpha A_w}{(1+\alpha+\alpha A_w)}$ e $\alpha = \dfrac{\Delta L}{2}$

$$F(r,s+1) = B_1 F(r,s) + B_2\left[f(r,s+1) + f(r,s)\right] \quad (13)$$

onde: $B_1 = \dfrac{(1-\beta)}{(1+\beta)}$; $B_2 = \dfrac{\beta}{(1+\beta)}$ e $\beta = \dfrac{\Delta z}{2}$

$$F_w(r,s+1) = C_1 F_w(r,s) + C_2\left[f(r,s+1) + f(r,s)\right] \quad (14)$$

onde: $C_1 = \dfrac{(1-\beta B_w - \beta C_w)}{(1+\beta B_w + \beta C_w)}$ e $C_2 = \dfrac{\beta C_w}{(1+\beta B_w + \beta C_w)}$

PROCEDIMENTO DE INTEGRAÇÃO

Para o começo da integração temos as seguintes condições de contorno e iniciais:

1. As temperaturas do gás na entrada do leito são:

   $f(0,s) = 1$ para o período de aquecimento e

   $f(0,s) = f_{r1}$ para o período de resfriamento

2. No início do primeiro período, as temperaturas da fase sólida, são:

   $F(r,0) = F_w(r,0) = F_{si}$

e para o começo dos períodos sucessivos, são:

$F(r,0) = F'(\Lambda/dL-r, \Pi/dz)$ e $F_w(r,0) = F'_w(\Lambda/dL-r, \Pi/dz)$

As temperaturas do gás para o começo do período, ao longo do regenerador, são calculadas pela equação (12), ficando:

$$f(r+1,0) = A_1 f(r,0) + A_2\left[F(r+1,0) + F(r,0)\right] + A_3\left[F_w(r+1,0) + F_w(r,0)\right] \quad (15)$$

para $r = 0,1,2...(\Lambda/dL-1)$

Agora avaliam-se as temperaturas da fase sólida na entrada do leito, $F(0,1)$ e $F_w(0,1)$, pelas equações (13) e (14), conhecendo-se $F(0,0)$, $F_w(0,0)$ e $f(0,0)$.

No próximo passo são calculadas as temperaturas do gás e da fase sólida, ao longo do regenerador, com o seguinte procedimento:

Como as equações (13) e (14) envolvem o conhecimento anterior de $f(r,s+1)$, sendo que esta pode ser avaliada pela equação (12), ficando:

$$f(r,s+1) = A_1 f(r-1,s+1) + A_2\left[F(r,s+1) + F(r-1,s+1)\right] + A_3\left[F_w(r,s+1) + F_w(r-1,s+1)\right] \quad (16)$$

substituindo (13) e (14) em (16), e após um rearranjo, tem-se:

$$f(r,s+1) = K_1 f(r-1,s+1) + K_2\left[B_1 F(r,s) + B_2 f(r,s) + F(r-1,s+1)\right] + K_3\left[C_1 F_w(r,s) + C_2 f(r,s) + F_w(r-1,s+1)\right] \quad (17)$$

onde: $K_1 = \dfrac{A_1}{(1-A_2B_2-A_3C_2)}$; $K_2 = \dfrac{A_2}{(1-A_2B_2-A_3C_2)}$ e

$K_3 = \dfrac{A_3}{(1-A_2B_2-A_3C_2)}$

Os cálculos das temperaturas do gás ao longo do regenerador para cada intervalo de tempo são feitos pela equação (17), e em seguida são avaliadas as temperaturas do recheio e parede pelas equações (13) e (14), respectivamente, onde $r = 1,2...\Lambda/dL$.

A integração continua durante todo o período ($s=0,1,2...\Pi/dz$). No final do período são aplicadas as condições iniciais e de contorno, para escoamento contracorrente, e a integração sobre o período que sucede segue continuamente. Um ciclo de operação compreende um período de aquecimento seguido por um período de resfriamento, cada período é definido pelo seu comprimento reduzido Λ, seu período reduzido Π e a temperatura do gás, na entrada do leito.

Após alguns ciclos sucessivos o equilíbrio cíclico é atingido, onde as temperaturas transientes do gás na saída, no período de resfriamento, após dois ciclos sucessivos, diferem num valor menor igual a 10^{-4}.

Quando o equilíbrio cíclico é alcançado, calculam-se as eficiências térmicas pelas expressões:

$$\eta_a = \frac{1}{P}\frac{\int_0^P \left[t_{a1} - t_{a2}(t)\right]dt}{t_{a1} - t_{r1}}$$, para o período de aquecimento e

$$\eta_r = \frac{1}{P}\frac{\int_0^P \left[t_{r2}(t) - t_{r1}\right]dt}{t_{a1} - t_{r1}}$$, para o período de resfriamento, as

quais na forma adimensional, ficam:

$$\eta_a = \frac{1}{\Pi}\frac{\int_0^{\Pi}\left[1-f_{a2}(z)\right]dz}{1-f_{r1}} \qquad (18)$$

$$\eta_r = \frac{1}{\Pi}\frac{\int_0^{\Pi}\left[f_{r2}(z)-f_{r1}\right]dz}{1-f_{r1}} \qquad (19)$$

, respectivamente.

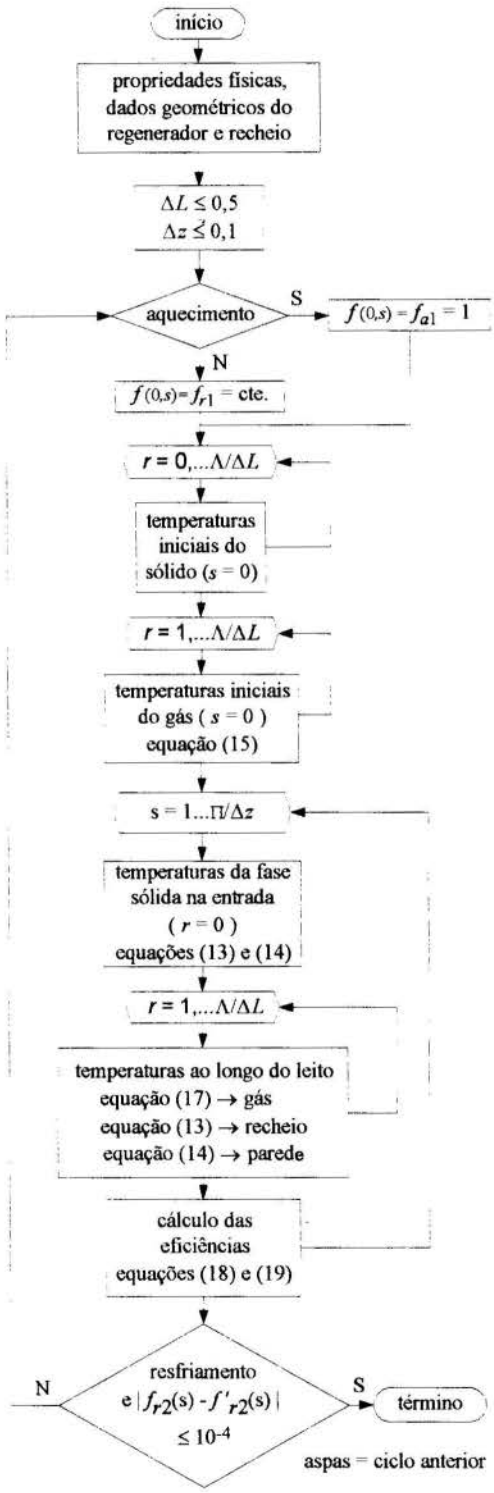


figura 3 - Fluxograma simplificado

Os incrementos utilizados foram de $\Delta L \leq 0{,}5$ e $\Delta z \leq 0.1$, garantindo uma convergência até a quinta casa decimal.

O fluxograma simplificado do procedimento de integração é apresentado na figura 3.

Os coeficientes de transferência de calor convectivo entre o recheio e o gás e entre a parede interna e o gás, foram calculados pela seguinte correlação:

$$j_h\varepsilon = 0{,}00821\,\mathrm{Re}_m^{0{,}231} \quad \text{para } 100 \leq \mathrm{Re}_m \leq 1100 \qquad (20)$$

onde: $\mathrm{Re}_m = 2Gd_p/\left[3\mu\left(1-\varepsilon\right)\right]$ Reynolds modificado

$j_h = St\,Pr^{1/3}$ fator j de Colburn para transferência de calor

$St = h/Gc_g$ número de Stanton e

$Pr = c_g\mu/k_g$ número de Prandtl

obtida pelo método da minimização das eficiências térmicas médias (Luporini, 1994).

Para a parede externa e o ambiente foi utilizada uma correlação para convecção natural em superfícies verticais (Perry e Chilton, 1973).

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os experimentos (Luporini, 1994) foram realizados em um regenerador construido com tubo de aço de 0,058m de diâmetro externo, 0,003m de espessura e 0,188m de comprimento. E com a finalidade de reduzir os vazios entre o recheio e a parede, a superfície interna do regenerador foi forrada com borracha esponjosa de 0,004m de espessura, proporcionando a obtenção de um perfil de velocidade mais uniforme, externamente o regenerador foi isolado com duas camadas de fibra cerâmica.

Nas tabelas 1 e 2 são observadas que as eficiências no período de aquecimento são maiores do que no período de resfriamento, pois no aquecimento, a parede e o recheio recebem calor do gás e assim a temperatura do gás na saída é reduzida, enquanto que no resfriamento o recheio e a parede perdem calor para o gás frio e a parede continua perdendo calor com o ambiente, simultaneamente.

Tabela 1 - razões entre capacidades caloríficas e entre coeficientes de transferência de calor.

exp	mat	U	P(s)	$\frac{(mc_p)_b}{(mc_p)_w}$	médio $\frac{h_o A_{ow}}{h_i A_{rw}}$
A1	1	0,377	120	1,427	0,241
A2	1	0,566	180	1,427	0,255
A3	1	0.943	300	1,427	0,263
A4	1	1,132	360	1,427	0,264
B1	2	0,444	180	2,404	0,160
B2	2	0,741	300	2,404	0,169
B3	2	1,037	420	2,404	0,167

exp: série da experiência, mat: material,
$U = \Pi/\Lambda$: fator de utilização,
subscritos: b = recheio, w = parede
1: esferas de vidro, d_p = 0,0038m, G = 0,756kg/m^{2}s
2: esferas de aço, d_p = 0,00635m, G = 1kg/m^{2}s

Tabela 2 - Comparações entre as eficiências experimentais e as eficiências simuladas

	experimental			adiab	não adiabático		
exp	η_a	η_r	η_m	η	η_a	η_r	η_m
A1	0,988	0,788	0,888	0,878	0,935	0,750	0,843
A2	0,945	0,778	0,862	0,863	0,929	0,708	0,819
A3	0,893	0,705	0,799	0,806	0,912	0,622	0,767
A4	0,887	0,643	0,765	0,760	0,894	0,587	0,741
B1	0,922	0,768	0,845	0,824	0,896	0,733	0,815
B2	0,861	0,730	0,796	0,792	0,887	0,683	0,785
B3	0,848	0,635	0,742	0,739	0,863	0,641	0,752

adiab: adiabático

Os resultados também mostram que para regeneradores em escoamento contracorrente, à medida que os períodos diminuem as eficiências aumentam.

São observados para este caso, que teoricamente, as eficiências adiabáticas são maiores que as eficiências não adiabáticas médias, isto ocorre porque as perdas de calor pelas vizinhanças são maiores que a armazenagem de calor pela parede que é muito fina.

Os valores teóricos das eficiências adiabáticas se aproximam mais das eficiências não adiabáticas médias à medida que $(mc_p)_b/(mc_p)_w$ aumenta e $(h_oA_{ow})/(h_iA_{iw})$ diminue, o que assegura uma capacidade calorífica do recheio maior que a da parede e uma diminuição da transferência de calor para o ambiente.

A simulação não adiabática apresenta valores diferentes das eficiências no aquecimento e resfriamento, e estes se aproximam mais dos valores experimentais do que a simulação adiabática.

As figuras 4 a 7 mostram que as distribuições transientes das temperaturas do gás na saída do leito, durante os experimentos no regenerador da figura 1, se aproximam mais do modelo não adiabático, principalmente no período de aquecimento. O desvio maior para o recheio de esferas de vidro, no resfriamento, se deve ao fato que o material do leito é diferente do material da parede, concluindo que este modelo matemático é mais preciso quando o recheio e a parede são de materiais semelhantes, o que ocorre nas curvas das figuras 4 e 5.

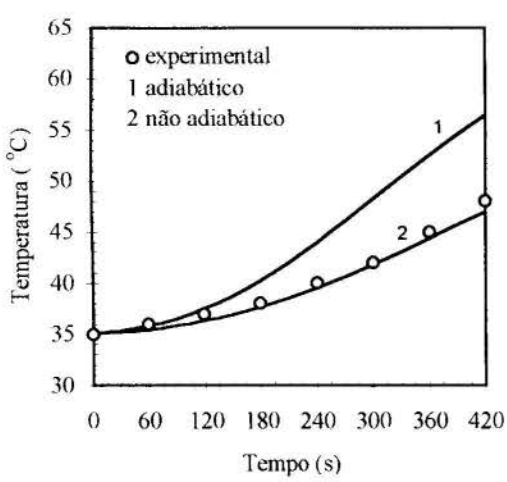


Figura 4 - Temperaturas do gás na saída, para as esferas de aço, durante o período de aquecimento

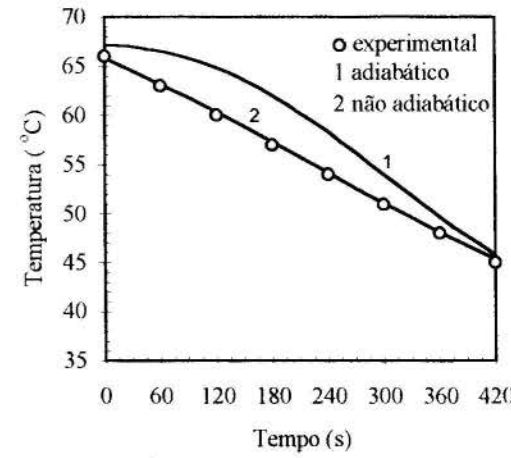


Figura 5 - Temperaturas do gás na saída, para as esferas de aço, durante o período de resfriamento

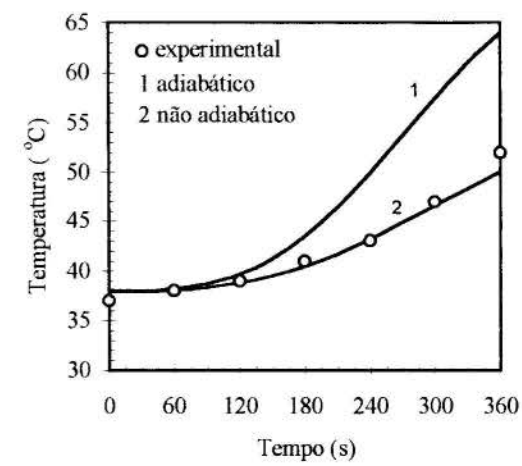


Figura 6 - Temperaturas do gás na saída, para as esferas de vidro, durante o período de aquecimento

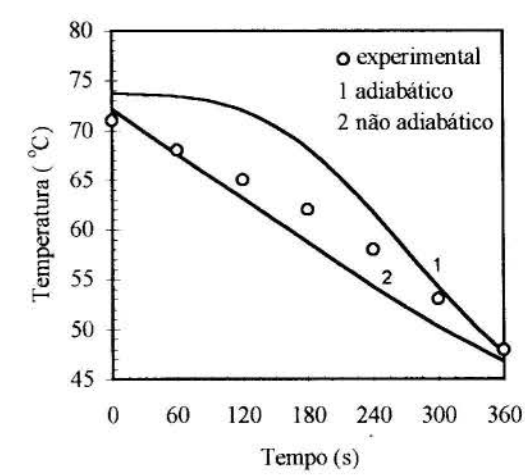


Figura 7 - Temperaturas do gás na saída, para as esferas de vidro, durante o período de resfriamento

CONCLUSÕES

Neste trabalho foi apresentado um modelo matemático para regeneradores não adiabáticos juntamente com o pocedimento numérico e alguns resultados das simulações. Também foram feitas algumas comparações com valores experimentais e com o modelo para regeneradores adiabáticos.

As observações mostraram que:

- Para baixos valores de $(h_o A_{ow})/(h_i A_{iw})$ unidos a altos valores de $(mc_p)_b/(mc_p)_w$ são reduzidos os efeitos da armazenagem de calor na parede e perdas de calor para o ambiente.
- A distribuição transiente de temperatura experimental, se aproxima mais dos valores da simulação não adiabática, porém esta entre os valores simulados dos dois modelos.
- As diferenças nas eficiências para os períodos de aquecimento e resfriamento são consequências das perdas de calor do regenerador.
- O modelo não adiabático apresentado representa melhor o sistema, porém os valores médios experimentais se aproximam mais das eficiências para regeneradores adiabáticos, o que se conclue que ocorre uma compensação entre os dois períodos.

BIBLIOGRAFIA

Heggs, P. J. and Foumeny, E. A., 1986, "Thermal Performance of Diabatic Cyclic Regenerators", *Numerical Heat Transfer*, vol. 9, pp. 183-199.

Handley, B. and Heggs, p. j. , 1969, "The Effect of Thermal Conductivity of the Packing Material on Transient Heat Transfer in a Fixed Bed", *Int. J. Heat Mass Transfer*,vol. 12, pp. 549-570.

Hargraves, J. C. et al. , 1984, "A Review of Some Experimental Investigations on Regenerators", *The Instituion of Chemical Engineers Synposium Séries*, No. 86, Oxford: Pergamon, pp. 473-490.

Luporini, S. , 1994,"Transferência de Calor em Regime Transiente: Análise Térmica de Regeneradores de Calor", Tese de Doutorado, UNICAMP.

Perry, R. H. and Chilton, C. H. , 1973, "Chemical Engineer's Handbook", McGraw-Hill International Book Company, fifth edition.

Willmott, A. J. , 1964, "Digital Computer Simulation of a Thermal Regenerator", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol.7, pp. 1291-1302.

Willmott, A. J. , 1969, "The Regenerative Heat Exchanger Computer Representation", *Int. J. Heat Mass Transfer*, vol. 12, pp. 997-1014.

ABSTRACT

Many mathematical models have been devoted to the simulation of thermal regenerators, mostly considering the process as adiabatics. In the present work is developed a model which includes the storage of heat in the regenerator walls as well as heat losses, which can be quite important in some situations. The differential equations of this model are solved used the trapezoidal difference representation. The results of the simulations are compared with experimentally obtained data and the results permits one to determine under which operational conditions those effects may be reduced.

Pallotti

Av. Plinio Brasil Milano, 2145
Fone 341 0455 P. Alegre RS